دانشگاه فردوسی مشهد

انتشارات دانشگاه فردوسی (مشهد)، شماره ۱۰۷

مبانی نظریهٔ کوانتومی

سل ویدر

دانشگاه فیرلی دیکینسون

ترجمه

جعفر گودرزی

استادیار فیزیک دانشگاه فردوسی (مشهد)

۱۳۶۸

نام کتاب : مبانی نظریه کوانتومی
مؤلف : سل ویدر
مترجم : جعفر گودرزی
ویراستار : دکتر محسن سربیشه‌ای
طراح و مونتاژ : محسن مومنی مهرجردی
ناشر : انتشارات دانشگاه فردوسی (مشهد)
تیراژ : ۲۰۰۰ نسخه
تاریخ انتشار : مهرماه ۱۳۶۸
چاپ و صحافی : چاپخانه دانشگاه فردوسی (مشهد)
قیمت : ۱۵۶۰ ریال

فهرست مطالب

عنوان	صفحه
پیشگفتار	سیزده
قسمت اول : سیستمهای یک ذره‌ای	۱
فصل ۱ جنبه‌های تاریخی	۳
۱ تابش جسم سیاه	۳
۲ مدهای مشخصه در داخل یک کاواک	۶
۳ نظریه (کلاسیکی) رالی[1] ـ جینز[2]	۱۰
۴ نظریه (کوانتومی) پلانک[3]	۱۱
۵ اثر فوتوالکتریک	۱۳
۶ اثر کامپتون[4]	۱۶
۷ نظریه کوانتومی ماده	۱۷
۸ فرضیه دوبروی[5] و آزمایش داویسن[6] ـ جرمر[7]	۱۸
۹ نظریه بوهر[8] برای هیدرژن	۱۹

1- Rayleigh
2- Jeans
3- Planck
4- Compton
5- De Broglie
6- Davisson
7- Germer
8- Bohr

۱۰ اصل تناظر ۲۲
۱۱ خلاصه ۲۳
مسائل ۲۴

فصل ۲ مکانیک کلاسیکی ۲۷

۱ شکل نیوتنی مکانیک (غیرنسبیتی) ۲۷
۲ معادلات لاگرانژ[9] ۳۲
۳ معادلات هامیلتون[10] ۴۱
۴ کروشه‌های پواسن[11] ۴۴
۵ دینامیک نسبیتی ۴۶
مسائل ۴۷

فصل ۳ صورتبندی مکانیک کوانتومی ۵۱

۱ بردارها در یک فضای مختلط خطی N بعدی ۵۱
۲ عملگرهای خطی ۵۶
۳ ویژه مقدارها و ویژه بردارها ۶۰
۴ جبر ویژه مقدارها و ویژه‌بردارها برای عملگرهای هرمیتی[12] ۶۲
۵ جابه‌جاگر و مسئله ویژه مقدار ۶۵
۶ عملگر تصویرگر ۶۷
۷ اصول موضوع مکانیک کوانتومی ۷۰
۸ دینامیک کوانتومی ۷۸
۹ حالتهای مانا ۸۳
۱۰ ابعاد " فضای کوانتومی" ۸۴
۱۱ نمایش مختصه‌ای ۸۷
۱۲ گذار به‌مکانیک موجی ۸۹

9- Lagrange
10- Hamilton
11- Poisson
12- Hermite

معادله موج شرودینگر[13] ۹۳
معادله موج شرودینگر و جریان احتمال ۹۶
مسائل ۹۹

فصل۴ مکانیک موجی در یک بعد ۱۰۵

طبقه‌بندی حالتهای مانا در مکانیک موجی ۱۰۵
ذره آزاد در یک بعد ۱۰۸
پراکندگی از سدهای یک بعدی ۱۰۹
سد مستطیلی ۱۱۱
حالتهای مانای مقید در یک بعد ۱۱۶
چاه نامتناهی ۱۱۸
چاه متقارن نامتناهی ۱۲۱
پاریته ۱۲۲
چاه متقارن متناهی ۱۲۵
نوسانگر هماهنگ ۱۲۹
خواص ویژه تابعهای نوسانگر ۱۳۵
نوسانات در حالتهای غیرمانا ـ تناظر کلاسیکی ۱۳۸
مسئله نوسانگر در نمادگذاری دیراک[14] ـ روش نردبانی ۱۴۰
مسائل ۱۴۶

فصل۵ مکانیک موجی در سه‌بعد ۱۵۳

مسئله ویژه مقداری در سه‌بعد ۱۵۴
ذره آزاد (مختصات دکارتی) ۱۵۴
ذره در یک جعبه ۱۵۸
نو سانگر ناهمسانگرد ۱۶۱
مختصات منحنی‌الخط ۱۶۲

13- Schrodinger 14- Dirac

۶ مسئله نیروی مرکزی ۱۶۵
۷ کوانتش تکانه زاویه‌ای ۱۶۹
۸ ذره آزاد (مختصات کروی) ۱۷۵
۹ نوسانگر همسانگرد ۱۷۶
۱۰ حالتهای مقید یک پتانسیل جاذبه کولنی ۱۷۹
۱۱ اتم هیدرژن ۱۸۳
۱۲ پاریته و مسئله نیروی مرکزی ۱۸۸
۱۳ اثر میدان مغناطیسی یکنواخت روی مسئله نیروی مرکزی ۱۹۰
مسائل ۱۹۹

فصل ۶ تکانه زاویه‌ای اسپینی ۲۰۳

۱ نظریه پاولی[15] برای اسپین الکترون ۲۰۴
۲ خواص تبدیل کتهای اسپینی ـ تکانه زاویه‌ای کل ۲۰۹
۳ اسپین و مسئله نیروی مرکزی ۲۱۱
۴ مغناطیس اسپینی و برهم‌کنش اسپین ـ مدار در هیدرژن ۲۱۵
۵ میدانهای مغناطیسی خارجی ـ اثر پاشن ـ باک[16] ۲۱۸
مسائل ۲۲۱

فصل ۷ روشهای تقریبی ۲۲۳

۱ نظریه پریشیدگی ۲۲۳
۲ نظریه پریشیدگی مانای حالت مقید ناتبهگن (روش رالی ـ شرودینگر) ۲۲۴
۳ یک کاربرد از نظریه مرتبه اول ۲۲۸
۴ نظریه مرتبه دوم ۲۳۰
۵ پریشیدگی یک تراز تبهگن ۲۳۲
۶ کاربرد نظریه پریشیدگی در یک تراز تبهگن ـ اثر استارک[17] در هیدرژن ۲۳۶

15- Pauli
16- pashen-Back
17- Stark

۷	اتم هیدرژن با برهم‌کنش اسپین ــ مدار	۲۳۹
۸	اثر غیرعادی زیمن[18] در هیدرژن	۲۴۴
۹	نظریه پریشیدگی وابسته به‌زمان	۲۴۷
۱۰	گذارهای القاءشده به‌وسیله یک پریشیدگی ثابت	۲۴۹
۱۱	گذارهای مرتبه اول ــ قاعده طلائی فرمی[19]	۲۵۱
۱۲	تصحیحات مرتبه‌های بالاتر قاعده طلائی	۲۵۴
۱۳	گذارهای القاءشده به‌وسیله یک پریشیدگی هماهنگ	۲۵۶
۱۴	گذارهای تابشی در هیدرژن	۲۵۷
۱۵	دیدگاه اینشتین[20] در گسیل خود به‌خود ــ توازن دقیق	۲۶۱
۱۶	روش وردشی (رالی ــ ریتس[21])	۲۶۳
	مسائل	۲۶۸

فصل۸ نظریه پراکندگی ۲۷۳

۱	نظریه کلاسیکی پراکندگی	۲۷۳
۲	نظریه کوانتومی مانای (حالت پا برجا) پراکندگی	۲۷۷
۳	پراکندگی راترفورد[22] (مورد کوانتومی)	۲۸۰
۴	بررسی پراکندگی مانا به‌روش پریشیدگی ــ سری بورن	۲۸۴
۵	تقریب اول بورن[23]	۲۸۸
۶	تقریبهای بالاتر بورن	۲۹۲
۷	روش امواج جزئی	۲۹۳
۸	تقریب جابه‌جایی فاز جزئی	۲۹۷
۹	پراکندگی S ــ موج	۳۰۰
۱۰	پراکندگی کوانتومی دینامیکی و گذارها .	۳۰۳
۱۱	پراکندگی ناکشسان و جذب	۳۰۶
	مسائل	۳۰۷

18- Zeeman
19- Fermi
20- Einstein
21- Rayleigh-Ritz
22- Rutherford
23- Born

قسمت دوم : سیستمهای چندذره‌ای ۳۱۱

فصل۹ ذرات بدون برهم‌کنش ۳۱۳

۱ مکانیک کلاسیکی ۳۱۳
۲ گذار به‌مکانیک کوانتومی ۳۱۷
۳ نمایش مختصه‌ای و مکانیک موجی ۳۱۸
۴ عملگر جایگشت ۳۲۰
۵ سیستمهای ایده‌آل تمیزپذیر ۳۲۴
۶ سیستمهای ایده‌آل تمیزناپذیر ۳۲۷
۷ همبستگی‌های آماری در سیستمهای ایده‌آل بوز[۲۳] و فرمی ۳۲۹
۸ اتم هلیوم " ایده‌آل " ۳۳۱
۹ حالتهای برانگیخته در هلیوم ۳۳۳
۱۰ گاز ایده‌آل کوانتومی ۳۴۲
۱۱ نمایش N ، عملگر چگالی، و آمار کوانتومی ۳۴۴
مسائل ۳۵۱

فصل۱۰ سیستمهای چندذره‌ای برهم‌کنش‌کننده ۳۵۵

۱ مسئله دوجسمی منزوی ۳۵۶
۲ پراکندگی از یک هدف متحرک ۳۵۹
۳ اتم هلیوم ــ بررسی به‌روش پریشیدگی ۳۶۳
۴ اتم هلیوم ــ یک روش وردشی ۳۶۷
۵ مدل آماری توماس[۲۴] و فرمی برای اتمهای پیچیده ۳۶۹
۶ روش میدان خودــ سازگار و تقریب هارتری[۲۵]ــ فوک[۲۶]ــ اسلاتر[۲۷] ۳۷۳
۷ خواص اتمها در تقریب HFS ۳۷۸

23- Bose
24- Thomas
25- Hartree
26- Fock
27- Slater

۸ مولکولهای دو اتمی ــ تقریب بی‌دررو ۳۸۲
۹ مولکول هیدرژن و پیوند کووالانت (نظریه لندن ــ هایتلر[۲۸]) ۳۸۹
۱۰ تبدیل به‌مختصات بهنجار، شبکه خطی، فونونها ۳۹۳
مسائل ۴۰۰

قسمت سوم : مکانیک کوانتومی نسبیتی و نظریه میدانها ۴۰۵

فصل ۱۱ مکانیک کوانتومی نسبیتی ۴۰۷

۱ معادله کلاین[۲۹] ــ گوردون[۳۰] ۴۰۷
۲ معادله دیراک ۴۱۱
۳ ذرات آزاد دیراک ۴۱۳
۴ حالتهای انرژی منفی ۴۱۵
۵ یک ذره دیراک در یک میدان ایستا ۴۱۷
۶ ذره دیراک در یک پتانسیل کولنی ــ ساختار ریز در هیدرژن ۴۲۱
مسائل ۴۲۶

فصل ۱۲ نظریه میدان کوانتومی ۴۲۹

۱ نظریه کلاسیکی میدانها ۴۳۰
۲ چگالی هامیلتونی ۴۳۲
۳ کوانتش میدان ۴۳۳
۴ الکترودینامیک کلاسیکی ۴۳۴
۵ هم‌ارزی بین تابش آزاد و نوسانگرها ۴۳۹
۶ کوانتش میدان (عرضی) تابش آزاد ۴۴۱
۷ الکترودینامیک کوانتومی ــ گذارهای تابشی ۴۴۳
۸ پهن‌شدگی خطوط طیفی ــ رابط عدم قطعیت انرژی ــ زمان ۴۴۹

28- London-Heitler 29- Klein

30- Gordon

مسائل ۴۵۱
پیوست الف : تقریب ونتزل[۳۱]ـ کرامرز[۳۲]ـ بریلوئن[۳۳] (WKB یا "انتگرال‌فاز") ۴۵۵
پیوست ب : تصویرهای هایزنبرگ[۳۴] و برهم‌کنش ۴۶۵
واژنامه : ۴۷۱
فهرست راهنما : ۴۷۵

31- Wentzel

32- Kramers

33- Brillouin

34- Heisenberg

پیشگفتار

برنامه فیزیک دورهٔ لیسانس در بسیاری از دانشکده‌ها در جهتی مورد تجدیدنظرقرار گرفته است‌که دردونیمسال اول‌مطالبی ازفیزیک جدیدرا بپوشاند ومکانیک کوانتومی را بر یک پایهٔ نیمه کمی بررسی کند . دانشجو سپس درسی می‌گیرد که بر پایه نظریه کوانتومی صوری استواراست . این‌کتاب‌گذار آرامی از کارهای اولیهٔ دورهٔ لیسانس‌به‌مطالب پیشرفته‌تر را فراهم می‌آورد . متن حاضر شکل تکمیل یافتهٔ یادداشتهائی است‌که در یک درس دو نیمساله در دانشگاه فیرلی‌دیکینسون[1] مورد استفاده قرار گرفته بودند . دروس پیش‌نیاز آن مکانیک، الکتریسیته و مغناطیس، و فیزیک جدید است .

بنابر تجربهٔ شخصی‌ام ، دو روش آموزشی را برای نظریهٔ کوانتومی مفید تشخیص داده‌ام . روش اول به‌طور نسبتا" زیادی بر شباهت بین معادلهٔ موج در اپتیک فیزیکی و معادلهٔ شرودینگر استوار است . این دیدگاه در واقع مسئول محدودکنندگی و نارسائی‌عنوان " مکانیک موجی " است . چون فرضیهٔ دوبروی به‌عنوان سنگ زیر بنای مکانیک موجی به‌کار می‌رود ، این روش به‌طور محسوسی با گسترش تاریخی سازگار است . به علاوه ، حد کلاسیکی براحتی می‌تواند از طریق مقایسه با اپتیک هندسی ، با نشان‌دادن شباهتهای معادلهٔ هامیلتون ـ ژاکوبی[2] و معادلهٔ آیکونال ، توضیح داده شود . با این‌وجود تناظر صوری بین مکانیک کلاسیکی و مکانیک کوانتومی صریحا" روشن نیست .

در این متن ، من انتخاب دوم را ، که گاهی اوقات "روش بندادی" نامیده می‌شود ، برگزیده‌ام . اهمیت این روش که نخست هامیلتونی کلاسیکی را برحسب مختصات بندادی و

1- Fairleigh Dickinson 2- Jacobi

تکانه‌های همیوغ آنها نوشته وسپس تقارنهای مربوط به‌مسئله‌را مطالعه‌کنیم یکی‌از موضوعهای مهم این کتاب را تشکیل می‌دهد .از این نظراین‌کتاب به‌دقت روش ظریف ولی صوری‌دیراک را دنبال می‌کند* . این کتاب مطلب را به‌صورتی مطرح می‌کند که برای دانشجویان‌مطلوب‌تر است . تناظر بین نظریه‌های کلاسیکی و کوانتومی ازطریق مشابهت جابه‌جاگربا کروشه پواسن ساخته می‌شود . قضیه اهرنفست[3] به‌عنوان یک اصل موضوع برای ربط دادن‌معادلات‌کلاسیکی حرکت به‌معادلهٔ شرودینگر به‌کار می‌رود . بعداز ارائه شکل عمومی مکانیک موجی در نماد ـ گذاری "براکت[4]" ، نشان خواهیم داد که مکانیک موجی تنها یکی از چند نمایش نظریه کوانتومی است .

توافق عموم براین است که جایی که مکانیک موجی قابل اعمال باشد ، ساده‌ترین و مستقیم‌ترین راه برای بررسی مسئله است . بیشتر مسائل در این کتاب ، با ذراتی واقع در پتانسیلهای معلوم سروکار دارند و بدین ترتیب مکانیک موجی به‌طور وسیعی مورد استفاده قرارمی‌گیرد و روشهای حل‌معادله دیفرانسیل شرودینگر به‌طورمفصل موردبحث‌قرارمی‌گیرند . با این وجود ، هرجاکه‌امکان داشته‌باشد ، جوابها با استفاده از روشهای عمومی‌تر دیراک نیز به‌دست خواهند آمد . نظریه کوانتومی به‌مسائل منتخبی در فیزیک جدید ، با قصد اکید آموزش نظریه کوانتومی و نه فیزیک جدید ، اعمال می‌شود . احساس من این بوده است که بعدازارائه دقیق مکانیک‌کوانتومی ، فیزیک جدید به‌بهترین وجهی فهمیده و ارزیابی‌می‌شود . چون برهم‌کنشهای الکترومغناطیسی بهتر از دیگر برهم‌کنشها فهمیده می‌شوند ،عمدا" از اغلب کاربردها به‌فیزیک هسته‌ای احتراز کرده‌ام و بیشتر بحثها را به‌گسترهٔ اتمی و مولکولی محدود کرده‌ام .

این‌کتاب به‌سه‌قسمت تقسیم شده است ـ سیستمهای یک ذره‌ای (فصلهای ۱ تا ۸) ، سیستمهای چندذره‌ای (فصلهای ۹ و ۱۰) ، و مکانیک کوانتومی نسبیتی و نظریه میدانها (فصلهای۱۱ و ۱۲) . در قسمت اول ، فصلهای ۳ و ۷ مهم و تعیین کننده‌اند و احتمالا" تسلط دانشجو به‌آنها مشکلتر از سایر فصول حاصل خواهد شد . بدون توجه خاص به‌این دو فصل ، آنچه که به‌دنبال می‌آید ممکن است نامفهوم باشد . در قسمت دوم ، فصل ۹ به ذرات تمیزناپذیر و بدون برهم‌کنش می‌پردازد و موضوع تحت پوشش‌آن برای تقریبا" تمام شاخه‌های فیزیک اساسی است . فصل ۱۰ شامل سیستمهای ذرات برهم‌کنش کننده است ودر

---

* P.A.M. Dirac,"The Principles of Quantunm Mechanics," 4th ed. Oxford University, London, 1958.

3- Ehrenfest 4- Bra-Ket

صورت‌لزوم بعضی ازبخشهای آن می‌توانند نادیده‌گرفته شوند .قسمت سوم شامل‌موضوعهای قدری پیشرفته‌تر است و در صورت کمبود وقت می‌توان کلا" از آن چشم‌پوشی کرد . چنانچه تمام دوازده فصل بخواهند تحت پوشش قرار گیرند حداقل تا نیمه فصل ۷ بایستی در پایان نیمسال اول تدریش شده باشد .

من به‌همکاران، دانشجویان و ویراستارانی که با صرف وقت و کوشش خودموجبات بهترشدن این متن را فراهم آورده‌اند بسیار مدیونم . سپاس من به‌دانشجوی ممتازم آقای آلن بلومبرگ[5] که دست‌نوشت‌ها را بازخوانی‌کرد و به‌پروفسورآرتور[6] که بررسی‌های موشکافانه وی ازقسمتهای مشکل‌کتاب تعداد غلط‌ها را به‌نحو چشمگیری تقلیل‌داد . بخصوص‌ازپروفسور فلوری[7] و پروفسور زیدلر[8] به‌خاطر بحثهای بسیار جالب و پیشنهادهای ارزشمندشان‌درباره‌ٔ نظریه کوانتومی که این کتاب را بهبود بخشیدند سپاسگزارم . مسئولیت هرگونه اشتباه باقیمانده یا نارسائی، کاملا" متوجه خود من است . همسرم سوزان، در حالی که از فرزندانم آری،جان، و جرمی مواظبت می‌کرد با شکیبائی تمام دست‌نوشت‌هارا ، گاهی برای چندبار، ماشین می‌نمود و گوشزدهای سودمند بسیاری به‌من می‌کرد . وی به‌خاطر این زحمات و به‌خاطر گذشتی‌که درطول این‌کار از خود نشان‌داد ،شایسته‌خاصترین تشکرات من است .

5- Alan Blumberg

6- Arthur

7- Flory

8- Zeidler

قسمت اول

سیستمهای یك ذره‌ای

۱

جنبه‌های تاریخی

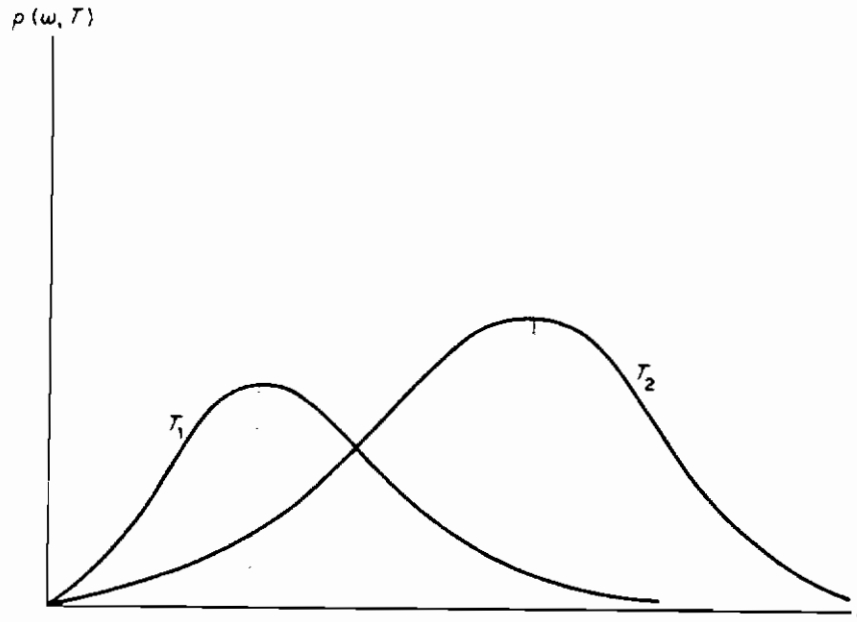
گسترش فیزیک در قرن بیستم ، با دو کشف بزرگ رقم زده شده‌است . اول ، نسبیت خاص (اینشتین ، ۱۹۰۵)که معادلات دینامیک کلاسیکی را وقتی‌سرعت ماده با سرعت نور قابل مقایسه می‌شود تصحیح می‌کند . دوم ، مکانیک کوانتومی (شرودینگر ،هایزنبرگ، بورن ، دیراک ، ۱۹۲۸—۱۹۱۰) که درمقایسه با قوانین نیوتنی تصویردقیق‌تری‌ازدینامیک‌سیستمهای میکروسکوپیکی به‌ما می‌دهد . در اواخر قرن نوزدهم ، شواهد تجربی بتدریج انباشته شدند وپیشنهاد می‌کردندکه نظریه‌های‌کلاسیکی نیوتن و ماکسول[1] برای توضیح بسیاری‌ازپدیده‌های وابسته به‌ماده و تابش مناسب نیستند . به‌عنوان اولین قدم در مطالعه مکانیک کوانتومی ، به‌بررسی بعضی‌از مسائلی‌که در اوائل قرن در مقابل فیزیکدانها قرار گرفته بود می‌پردازیم.

۱ ــ تابش جسم سیاه

ماده به‌طوردائم درحال‌گسیل وجذب تابش است . هرجسم در اثر اغتشاشات‌حرارتی تابش گسیل می‌دارد . به‌عنوان مثال ، یک فلز وقتی تا چندهزار درجه کلوین[2] گرم شود "ملتهب قرمز" می‌شود . بنابراین ، وقتی جسمی با دمای T در داخل محفظه بسته‌ای که قسمتی‌ازفضارا اشغال‌کرده است قرارگیرد ، محفظه حاوی تابش الکترو مغناطیسی‌خواهدبود .

1- Maxwell 2- Kelvin

در حالت تعادل، این تابش، تابش "جسم سیاه" نامیده می‌شود، و به‌طور تجربی ثابت شده است که شامل ترکیب مشخصی از فرکانسها (یعنی، رنگها) است که فقط تابع دمای کلوین T است و تابع ترکیب شیمیایی، محتویات یا شکل محفظه نیست.



شکل (۱–۱). چگالی تابشی جسم سیاه در دو دمای متفاوت کلوین $(T_2 > T_1)$.

چگالی طیفی تابش $\rho(\omega, T)$ را به‌صورت انرژی (در واحد حجم) تابشی‌ای که در گستره فرکانس (رادیان بر ثانیه) بین ω و $\omega + d\omega$ قرار داشته باشد، تعریف می‌کنیم. در شکل (۱–۱) چگالی طیفی در دو دمای متفاوت نشان داده شده است. سعی خواهیم کرد منحنی‌هائیرا، که منحنی‌های فوق دونمونه ازآنها هستند، از نظریه کلاسیکی به‌دست‌آوریم. شکست ما در این مورد، نمای بهتری از نیاز به‌مکانیک کوانتومی به‌ما می‌دهد و در عین‌حال تمرینی در فیزیک کلاسیکی برایمان فراهم می‌کند. از نظر ریاضی داریم

$$d\mathscr{E} = \rho(\omega, T)\, d\omega. \qquad (۱-۱)$$

چگالی انرژی کل مربوط به‌تمام فرکانسهای ممکن عبارت است از

$$\mathscr{E}(T) = \frac{E}{\mathscr{V}} = \int_0^\infty \rho(\omega, T)\, d\omega \qquad (۱-۲)$$

که در آن E انرژی کل و $\mathscr{V}$ حجم محفظه است.

کوششهای گوناگونی برای توضیح منشاء طیف جسم سیاه صورت گرفته بود. وین[۳] پیشنهاد

3- Wien

کرد که شکل عمومی چگالی طیفی می‌تواند با انجام یک فرایند ترمودینامیکی (چرخه کارنو[۴]) روی تابش داخل محفظه به‌دست آید . وی با درنظرگرفتن تابش به‌عنوان ماده کاردر ماشین کارنو ، به‌این نتیجه رسید که شکل عمومی $\rho(\omega, T)$ باید به‌صورت

$$\rho(\omega, T) = \omega^3 F\left(\frac{\omega}{T}\right) \qquad (۱-۳)$$

باشد ، که در آن F تابعی از متغیر $x = \omega/T$ است . ترمودینامیک به‌تنهائی نمی‌تواند تابع F را معین کند ،ولی آن نظریه‌هائی را که‌با قانون "وین" (۱ــ۳) مطابقت نمی‌کنند ازمیدان خارج می‌کند .

با استفاده از قانون وین و (۱ــ۲) ، چگالی انرژی کل در داخل محفظه خواهد شد

$$\mathscr{E}(T) = \int_0^\infty \omega^3 F\left(\frac{\omega}{T}\right) d\omega = T^4 \int_0^\infty x^3 F(x)\, dx \qquad (۱-۴)$$

که در آن $x = \omega/T$.

این انتگرال (اگر همگرا باشد) ایجاب می‌کند که چگالی انرژی کل در داخل محفظه متناسب باشد با T^4 ، یعنی ،

$$\mathscr{E}(T) = \sigma' T^4 \qquad (۱\text{ــ}۴\text{ الف})$$

که درآن ضریب ثابت عبارت‌است از $\sigma' = \int_0^\infty x^3 F(x)\, dx$. معادله (۱ــ۴ الف) چگالی‌انرژی الکترو مغناطیسی را به‌دمای کلوین مربوط می‌سازد . برای تابش همسانگرد، شار تابشی J (انرژی عبورکرده از واحد سطح در واحد زمان) به‌نوبه خود می‌تواند با رابطه

$$J = \tfrac{1}{4} c\mathscr{E}$$

به‌چگالی انرژی وابسته شود ، که در آن c سرعت نور است (رک مسئله ۱ــ۲) .معادله (۱ــ ۴ الف) خواهد شد

$$J = \tfrac{1}{4} c\sigma' T^4 = \sigma T^4. \qquad (۱-۵)$$

این ، قانون استفان ــ بولتزمن[۵] است‌که درآن ثابت استفان ــ بولتزمن عبارت است از

$$\sigma = \frac{c}{4} \int_0^\infty x^3 F(x)\, dx.$$

در حالی که σ به‌طور تجربی برابر با (cgs) $\sigma = ۰/۵۶۷\times۱۰^{-۴}$ به‌دست آمده بود ، $F(x)$ می‌بایستی به‌طور نظری تعیین می‌شد .

نتیجه دوم (۱ــ۳) قانون "جابه‌جائی" است که بنابر آن رنگ غالب (یعنی ، فرکانسی که در آن $\rho(\omega, T)$ بیشینه است) در داخل محفظه متناسب با دما است ، یعنی ،

4- Carnot 5- Stefan-Boltzmann

$$\omega_0 \propto T. \qquad (۱-۶)$$

این جا به‌جایی در فرکانس بر اثر دما به‌طور تجربی نیز تأیید شده بود . افزایش دمای یک ماده ، انتقالی از " قرمز ملتهب " به‌سوی " سفید ملتهب " ، که بیانگر حضور یک مولفه آبی‌رنگ است ، ایجاد می‌کند . فرکانس ω_0 که در آن ρ بیشینه است می‌تواند با مشتق‌گیری از (۱-۳) به‌دست آید . با به‌کاربردن متغیر $x = \omega/T$ خواهیم داشت

$$\left.\frac{\partial \omega^3 F(\omega/T)}{\partial \omega}\right|_{\omega=\omega_0} = T^4\left\{\frac{d}{dx}\, x^3 F(x)\right\}_{x=x_0} = 0$$
$$= T^4\{x_0{}^3 F'(x_0) + 3x_0{}^2 F(x_0)\} = 0$$

یا

$$x_0 F'(x_0) - 3F(x_0) = 0. \qquad (۱-۷)$$

برای هر تابع "معقول" $F(x)$ درقانون وین ، رابطه (۱-۷) یک معادله معمولی‌رانشان‌می‌دهد که می‌تواند نسبت به x_0 حل شود و رابطه

$$x_0 = \frac{\omega_0}{T} = \text{const.}$$

را به‌عنوان قانون جابه‌جایی (۱-۶) به‌دست دهد . البته ، مقدار ثابت بستگی به‌انتخاب F دارد . در واقع ، برای بعضی از توابع ، (۱-۷) جواب ندارد و قانون جابه‌جایی با شکست مواجه می‌شود .

به‌طور خلاصه ، مشاهده می‌کنیم که قانون وین منجر به‌یک چگالی طیفی می‌شود که هم با قانون " استفان ـ بولتزمن " سازگاراست وهم با قانون جابه‌جائی . ثابتهای وابسته‌به‌این قوانین به‌تابع بخصوص F ، که نمی‌تواند به‌کمک ترمودینامیک تنها تعیین شود ، بستگی‌دارند . در واقع ، جستجوی تابع F بود که پلانک را به‌کشف مکانیک کوانتومی هدایت کرد . بعدا " قوانین مکانیک والکترومغناطیس را ، به‌امید به‌دست‌آوردن تابع $F(\omega/T)$ ، به‌مدلهای‌متعددی اعمال خواهیم کرد .

۲ ـ مدهای مشخصه در داخل یک کاواک

درنظریه کلاسیکی ،تابش الکترومغناطیسی ترکیبی است ازارتعاشات میدانهای‌الکتریکی و مغناطیسی **E** و **B** . چون تابش جسم سیاه در داخل یک کاواک مستقل از شکل و ترکیب محفظه است ، انتخاب یک کاواک فلزی مکعبی شکل بزرگ نه‌تنها از عمومیت مسئله‌کم‌نمی‌کند

بلکه از نظر ریاضی تسهیلاتی فراهم می‌کند . قوانین الکترومغناطیس ایجاب می‌کنند که این میدانها در معادلات موج زیر صدق کنند

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = 0$$
$$\nabla^2 \mathbf{B} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \mathbf{B}}{\partial t^2} = 0 \qquad (۸-۱)$$

که در آن c سرعت نور در خلاء است . به‌علاوه ، میدانها باید در چند شرط مرزی در روی سطح فلز صدق کنند . به‌عنوان مثال ، مولفه‌های مماسی $\mathbf{E}$ و مؤلفه‌های قائم $\mathbf{B}$ باید در سطح فلز صفر شوند . این نکته ایجاب می‌کند که فقط بعضی از مدهای مشخصه (امواج ساکن) می‌توانند توسط کاواک حفظ شوند . مدها و فرکانسهای مشخصه آنها می‌توانند از قیاس با تار مرتعش به‌دست آیند .

مدهای طبیعی تار مرتعش با دو انتهای ثابت به‌وسیله

$$y_n = \exp(-i\omega_n t)\sin\frac{n\pi}{L}x \qquad (n = 1, 2, 3, \ldots) \qquad (۹-۱)$$

نمایش داده می‌شوند که در آن L طول‌تار است . این جوابها هم در معادله موج (۱ — ۸)و هم در شرایط مرزی (یعنی $y_n(0, t) = y_n(L, t) = 0$) صدق می‌کنند . می‌توان مستقیما" نشان داد که فرکانسهای طبیعی به‌وسیله

$$\omega_n = \frac{vn\pi}{L} \qquad (۱۰-۱)$$

که در آن v سرعت فاز امواج عرضی در طول تار است ، داده می‌شوند . هر مد با یک عدد صحیح n مشخص می‌شود و دارای یک فرکانس معین و یکتا است .

مدهای مربوط به‌تابش در داخل یک کاواک فلزی دارای شکلی‌شبیه به (۱—۹) هستند ، به‌استثنای اینکه این مدها با سه عدد صحیح مثبت l ، m و n مشخص می‌شوند . به علاوه ، با مقایسه با (۱—۱۰) ، فرکانسهای مشخصه با

$$\omega_{l,m,n} = \frac{c\pi}{L}(l^2 + m^2 + n^2)^{1/2}. \qquad (۱۱-۱)$$

داده می‌شوند . دراینجا L طول یک ضلع مکعب است . توجه کنیم که تمام مدها فرکانسهای متمایزی ندارند . به‌عنوان مثال ، از (۱ — ۱۱) نتیجه خواهد شد که سه "مد" $(l = 1,\ m = 2,\ n = 1)$ ، $(l = 1,\ m = 1,\ n = 2)$ و $(l = 2, m = 1, n = 1)$ دارای‌یک‌فرکانس یعنی ، $\omega = (c\pi/L)\sqrt{6}$ ، هستند . تعداد مدهائی که دارای یک فرکانس باشند ، $N(\omega)$ ، تبهگنی مد نامیده می‌شود و برابر است با دوبرابر تعداد طرقی‌که در آنها اعداد صحیح در

(۱–۱۱) می‌توانند به‌یک مقدار ω منجر شوند . ضریب دو از این واقعیت ناشی می‌شود که نور یک موج عرضی است و دارای دوحالت قطبش است . هرچه ω بزرگ‌تر می‌شود تعداد طرق ممکن برای انتخاب اعداد صحیح زیادتر می‌شود به‌طوری که $N(\omega)$ با ω افزایش پیدا می‌کند .

فرض کنیم که انرژی متوسط حرارتی یک مد در یک دمای مشخص، فقط با فرکانس آن معین شود ، یعنی ، فرض کنیم

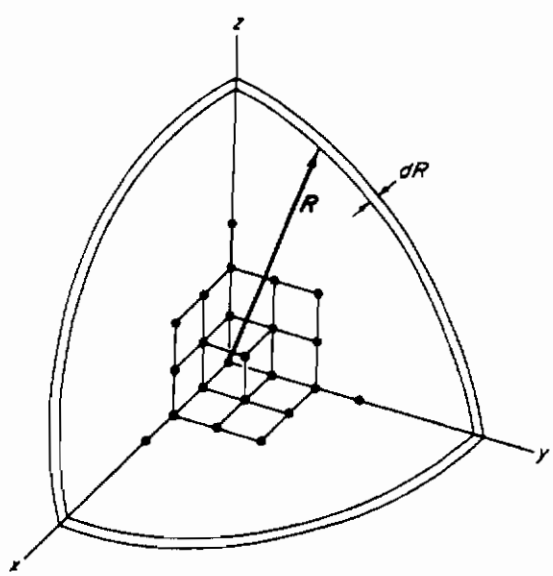
$$\bar{\varepsilon}_{l,m,n} = \bar{\varepsilon}(\omega). \qquad (۱ - ۱۲)$$

این فرض درزیر توجیه خواهد شد . اگر بخواهیم انرژی کل حمل شده به‌وسیله‌مدهای‌متفاوت را محاسبه کنیم ، می‌توانیم بنویسیم

$$E = \sum_{\omega} \bar{\varepsilon}(\omega) N(\omega). \qquad (۱ - ۱۳)$$

انرژی موجود در مدهائی که دارای یک فرکانس ω هستند دقیقا" عبارت است از انرژی هر مد ، $\bar{\varepsilon}(\omega)$ ، ضربدر تعداد مدهائی که دارای این فرکانس می‌باشند ، $N(\omega)$ ، انرژی کل با جمع بندی روی تمام فرکانسها به‌دست می‌آید . برای انجام این جمع بندی به‌نمایش صرفا" ریاضیاتی سیستم فیزیکی نظر می‌افکنیم .

مدهای داخل کاواک می‌توانند به‌وسیله نقطه‌هائی که معرف اعداد صحیح وابسته‌به‌آنها در $\frac{1}{8}$ اول فضای "اعداد صحیح" است نمایش داده شوند (شکل ۱–۲) . نقاط l ، m و n ، به



شکل (۱–۲) . نمایش مدها بوسیله نقطه‌هائی در $\frac{1}{8}$ اول فضای اعداد صحیح.

ترتیب ،روی محورهای x ، y و z نمایش داده شده‌اند . توجه کنیم که فرکانس مد به‌وسیله فاصله نقطه معرف مد از مبداء ،یعنی، $\omega = (c\pi/L)R$ تعیین می‌شود که در آن

$$R = (l^2 + m^2 + n^2)^{1/2}$$

تبهگنی مد ، $N(\omega)$ ، برابر است با دوبرابرتعداد نقاط مد واقع برروی $\frac{1}{8}$ اول کره‌ای بشعاع R .

برای تابش حرارتی نقاط مد غالبی که مورد توجه هستند دور از مبداء قرار دارند که مسلما"متناظرند با فرکانسهای بالاتر، یعنی، فرکانسهائی که در داخل ناحیه مادون قرمز یا بالاتراز آن قرار دارند . این مدها به‌قدری نزدیک به‌یکدیگر قرار دارند که می‌توان آنها را پیوسته تلقی کرد و تعداد مدهای بین ω و $\omega + d\omega$ را به‌صورت $dN = G(\omega)\, d\omega$ تعریف کرد ، که در آن $G(\omega)$ چگالی مد است که بعدا" آنرا محاسبه خواهیم کرد . انرژی کل داخل کاواک (۱ــ۱۳) خواهد شد

$$E = \int \bar{\varepsilon}(\omega)\, dN = \int \bar{\varepsilon}(\omega) G(\omega)\, d\omega \qquad (۱ - ۱۴)$$

برای پیداکردن $G(\omega)$ خاطرنشان کنیم که dN بیانگر حجمی از فضای اعداد صحیح است‌که‌در داخل لایه‌ای کروی به‌شعاع R و ضخامت dR ، در $\frac{1}{8}$ اول ، قرار دارد ، یعنی ،

$$dN = 2 \cdot \tfrac{1}{8} \cdot 4\pi R^2\, dR = \pi R^2\, dR \qquad (۱ - ۱۵)$$

ضریب ۲ از فیزیک سرچشمه می‌گیرد نه از مدل ریاضی به‌کار برده شده ، از این نظر که باید هردو درجه قطبش را در نظر بگیریم . با استفاده از $\omega = (c\pi/L)R$ خواهیم داشت

$$R^2\, dR = \left(\frac{L}{c\pi}\right)^3 \omega^2\, d\omega = \frac{\mathcal{V}}{c^3\pi^3}\, \omega^2\, d\omega \qquad (۱ - ۱۶)$$

که در آن $\mathcal{V} = L^3$ حجم کاواک است . بالاخره ، نتیجه می‌گیریم

$$dN = \frac{\mathcal{V}}{c^3\pi^2}\, \omega^2\, d\omega \qquad (۱ - ۱۷)$$

و چگالی مد عبارت است از

$$G(\omega) = \frac{\mathcal{V}}{c^3\pi^2}\, \omega^2 \qquad (۱ - ۱۸)$$

چگالی انرژی کل در داخل کاواک از (۱ــ۱۴) به‌صورت

$$\mathscr{E} = \frac{E}{\mathcal{V}} = \frac{1}{c^3\pi^2} \int_0^\infty \bar{\varepsilon}(\omega)\omega^2\, d\omega = \int_0^\infty \rho(\omega)\, d\omega \qquad (۱ - ۱۹)$$

به‌دست می‌آید که از آن می‌توان چگالی طیفی را به‌صورت زیر مشخص کرد

$$\rho(\omega) = \frac{1}{c^3\pi^2}\, \bar{\varepsilon}(\omega)\omega^2 \qquad (۱ - ۲۰)$$

برای تابش حرارتی (جسم سیاه)، انرژی متوسط $\bar{\varepsilon}$ هرمد نیزتوسط دمای کلوین تعیین می‌شود و (۱ـ۲۰) باید به‌صورت

$$\rho(\omega, T) = \frac{1}{c^3\pi^2}\bar{\varepsilon}(\omega, T)\omega^2 \qquad (۲۱-۱)$$

نوشته شود. بستگی صریح به‌دما را در زیر محاسبه خواهیم کرد.

برای پیداکردن $\bar{\varepsilon}$ از تشابه بین یک مد و یک نوسانگر هماهنگ ساده* با فرکانس طبیعی ω استفاده می‌کنیم. فرض اینکه این نوسانگر از نظر ماهیت کاملا" کلاسیکی است اساس نظریه رالی ـ جینز را تشکیل می‌دهد.

۳ ـ نظریه (کلاسیکی) رالی ـ جینز

مجموعه‌ای از نوسانگرهائی را که همه آنها دارای یک فرکانس می‌باشند ولی انرژیهای آنها متفاوتند درنظر بگیریم. طبق قانون کلاسیکی بولتزمن، کسری از نوسانگرها که انرژیشان ε است متناسب است با $e^{-\varepsilon/kT}$، که درآن k ثابت بولتزمن است ($k = ۱/۳۸\times۱۰^{-۱۶}$ erg/deg). انرژی متوسط با استفاده از نمایش مکانیک آماری کلاسیکی به‌صورت زیر به‌دست می‌آید**

$$\bar{\varepsilon}(\omega, T) = \frac{\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\varepsilon e^{-\varepsilon/kT}\,dp\,dx}{\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\varepsilon/kT}\,dp\,dx} \qquad (۲۲-۱)$$

که درآن انرژی نوسانگر عبارت است از

$$\varepsilon = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

انتگرالها می‌توانند مستقیما" محاسبه شده و به $\bar{\varepsilon}(\omega, T) = kT$ منجر شوند. این نتیجه جالب توجه است زیرا بنابرآن مادامی که انرژی یک نوسانگر بتواند به‌طور پیوسته تغییرکند، انرژی متوسط مستقل از فرکانس نوسانگرهای موردنظراست. با قراردادن $\bar{\varepsilon} = kT$ در (۱ـ۲۱) خواهیم داشت

$$\rho_{RJ}(\omega, T) = \frac{1}{c^3\pi^2}kT\omega^2 \qquad (۲۳-۱)$$

که همان چگالی طیفی رالی ـ جینز است.

---

* ایدهٔ معادل بودن یک مد تابشی و یک نوسانگر، یک ایدهٔ دقیقی است که در فصل ۱۲ ثابت خواهد شد.

** به‌عنوان مثال، به‌کتاب زیر مراجعه کنید:

C,Kittel,"Elementary Statistical physics," Chapter 11, Wiley, New York, 1958.

این چگالی در صورتی با قانون وین (۱–۳) سازگار است که قرار دهیم

$$F_{RJ}\left(\frac{\omega}{T}\right) = \frac{k}{c^3\pi^2}\left(\frac{\omega}{T}\right)^{-1} \qquad (۱-۲۴)$$

زیرا در این صورت (۱–۲۳) خواهد شد

$$\rho_{RJ} = \omega^3 F_{RJ}\left(\frac{\omega}{T}\right)$$

با اینکه نتیجه رالی ــ جینز با قانون وین سازگار است ، اما به‌دلائل زیر نمی‌تواند به‌عنوان چگالی طیفی جسم سیاه مورد قبول قرار گیرد :

(الف) رسم ساده $\rho_{RJ}(\omega, T)$ آشکار می‌کند که این چگالی بیشینه ندارد ، بلکه وقتی ω زیاد می‌شود به‌سمت بینهایت میل می‌کند . در نتیجه ، قانون جابه‌جائی نقض می‌شود .

(ب) چگالی انرژی کل $\mathscr{E} = \int_0^\infty \rho(\omega)d\omega$ بینهایت می‌شود ، که در تناقض مستقیم با قانون استفان ، یعنی ، $J = \sigma T^4$ ، است .

مشکل دوم به‌این علت پیش می‌آید که انتگرال در حد بالائی (فرکانسهای بالا) واگرا می‌شود . این واگرایی منشاء "فاجعه فرابنفش" مشهور است که ، همان‌طور که خواهیم دید ، به‌وسیلهٔ نظریه پلانک رفع خواهد شد .

۴ ــ نظریه (کوانتومی) پلانک

تحلیل پلانک دقیقاً" دنبالهٔ نظریه رالی ــ جینز است ، با این استثناء که او فرض‌کرد که انرژی یک نوسانگر با فرکانس ω طبق قاعده

$$\varepsilon_n = n\hbar\omega \qquad (۱-۲۵)$$

محدود یا "کوانتیده" است ، که در آن $\hbar = h/2\pi$ (h بار بخوانید) ، h ثابت جهانی پلانک و $n = ۰، ۱، ۲، \ldots$ است . انرژی متوسط حرارتی مشابه با (۱–۲۲) به‌وسیله قانون کوانتومی بولتزمن داده می‌شود

$$\bar{\varepsilon}(\omega, T) = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon_n \exp(-\varepsilon_n/kT)}{\sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\varepsilon_n/kT)} \qquad (۱-۲۶)$$

با مشاهده اینکه (۱ــ۲۶) می‌تواند به‌صورت

$$\bar{\varepsilon}(\omega, T) = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln\sum_{n=0}^{\infty}\exp(-\beta\varepsilon_n) \qquad (۱-۲۷)$$

،که در آن $\beta = 1/kT$ است ، نوشته شود ، حاصل‌جمع های فوق به‌آسانی محاسبه می‌شوند . با استفاده از $\varepsilon_n = n\hbar\omega$ ، حاصل جمع فوق خواهد شد

$$\sum_{n=0}^{\infty}\exp(-\beta n\hbar\omega) = \sum_{n=0}^{\infty}[\exp(-\beta\hbar\omega)]^n \qquad (۱-۲۸)$$

با قراردادن $y = e^{-\beta\hbar\omega}$ ، جمع فوق به‌صورت جمع یک سری هندسی درخواهد آمدوخواهیم داشت

$$\sum_{n=0}^{\infty} y^n = \frac{1}{1-y}$$

بنابراین

$$\sum_{n=0}^{\infty}\exp(-\beta\varepsilon_n) = \sum_{n=0}^{\infty}\exp(-\beta n\hbar\omega) = \frac{1}{1-e^{-\beta\hbar\omega}} \qquad (۱-۲۹)$$

با مشتق‌گیری از عبارت فوق ، که (۱ــ۲۷) ایجاب می‌کند ، و ساده‌کردن آن خواهیم داشت

$$\bar{\varepsilon}(\omega, T) = \frac{\hbar\omega e^{-\hbar\omega/kT}}{1-e^{-\hbar\omega/kT}} = \frac{\hbar\omega}{(e^{\hbar\omega/kT}-1)} \qquad (۱-۳۰)$$

توجه کنیم که شرط کوانتش (۱ــ ۲۵) منجر به‌یک انرژی متوسطی برای نوسانگر می‌شودکه هم تابع T است و هم تابع ω . با قراردادن (۱ــ۳۰) در (۱ــ۲۱) چگالی طیفی پلانک را به‌صورت زیر به‌دست خواهیم آورد

$$\rho_P(\omega, T) = \frac{\omega^2}{c^3\pi^2}\frac{\hbar\omega}{(e^{\hbar\omega/kT}-1)} = \omega^3 F_P\left(\frac{\omega}{T}\right) \qquad (۱-۳۱)$$

که در آن

$$F_P\left(\frac{\omega}{T}\right) = \frac{\hbar}{c^3\pi^2}[e^{(\hbar/k)(\omega/T)}-1]^{-1} \qquad (۱-۳۲)$$

فرمول پلانک با قانون وین سازگار است .ولی‌اکنون تابع پلانک ، $F_P(\omega/T)$ ، منجر به‌یک چگالی طیفی می‌شود که با مشاهدات تجربی نیز سازگار است (شکل ۱ــ۱) . هم قانون جابه‌جایی و هم قانون استفان ــ بولتزمن هردو مستقیما" از فرمول پلانک به‌دست می‌آیند .

برای مقایسه نظریه با تجربه ، راحت‌تر است که چگالی طیفی را ، به‌جای فرکانسها ، بر حسب طول موجها بیان کنیم . بنا به‌تعریف ، $\rho(\lambda, T)$ عبارت‌است ازانرژی حمل شده به‌وسیله

طول موجهای بین λ و $\lambda + d\lambda$. بنابراین

$$-\rho(\lambda, T)\, d\lambda = \rho(\omega, T)\, d\omega \qquad (۳۳-۱)$$

با استفاده از $\lambda = \frac{2\pi c}{\omega}$ و $d\lambda = -\frac{2\pi c}{\omega^2} d\omega$ نتیجه خواهیم گرفت

$$\rho(\lambda, T) = \frac{\omega^2}{2\pi c}\rho(\omega, T)$$

یا

$$\rho_P(\lambda, T) = \frac{8\pi hc}{\lambda^5}\left[\exp\left(\frac{hc}{\lambda kT}\right) - 1\right]^{-1} \qquad (۳۴-۱)$$

با قراردادن $h = ۶/۶۳\times۱۰^{-۲۷}$ erg-sec توافق بسیار خوبی با تجربه حاصل می‌شود .

تمام آنچه‌که برای حل مشکلاتی که با نظریه کلاسیکی داشتیم لازم بود عبارت بود از محدودکردن یا کوانتیده‌کردن انرژیهای یک نوسانگر بر طبق $\varepsilon_n = n\hbar\omega$.

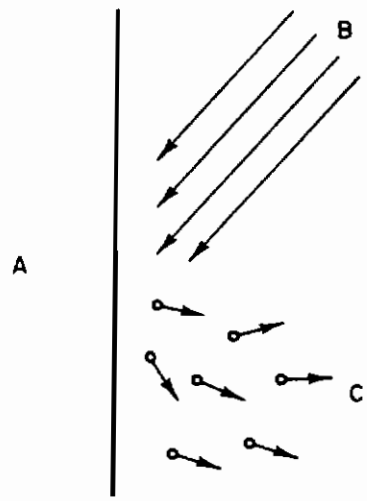
بعداً دلیل دیگری ارائه خواهد شد که نشان می‌دهد کوانتش باید در دیگر سیستمها نیز صورت گیرد .

۵ ـ اثر فوتوالکتریک

هر ماده از اتمهائی تشکیل شده است که ، به‌نوبه خود ، شامل الکترونها ، پروتونها ، و نوترونها هستند . دریک فلز بعضی‌از الکترونها در داخل فلز آزادانه حرکت کرده وازاتمی به‌اتم دیگر می‌روند . کمترین انرژی لازم برای اینکه یک الکترون را از فلز جدا کند *تابع کار* فلز نامیده می‌شود . انرژی لازم برای خارج‌کردن الکترون می‌تواند از طریق حرارتی (گسیل گرما یونی) ،برخورد ذرات پر انرژی (گسیل ثانوی) ، یا تابش الکترومغناطیسی (گسیل‌فوتونی) تأمین شود. در اینجا فرایند اخیر ، اثر فوتوالکتریک (شکل ۱ـ۳) ، را قدری دقیق‌تر بررسی می‌کنیم زیرا گسترشهای اولیه مکانیک کوانتومی را روشن‌تر می‌سازد .

در نظریه کلاسیکی ، انرژی یک موج الکترومغناطیسی با مربع دامنه آن متناسب است . درنتیجه ، هرفرکانسی که دامنه آن کافی باشد باید بتواند انرژی لازم برای خروج الکترونها

را تأمین کند . با این وجود ، از نظر تجربی ، افزایش دامنه ، یا در مورد نور ، درخشندگی ، باعث شروع گسیل فوتونی الکترون نمی‌شود . برخلاف تفکر کلاسیکی ، گسیل فوتونی‌الکترون با افزایش فرکانس تا بالاتر از یک مقدار آستانه ایجاد می‌شود . به‌طور تجربی معلوم شده است که این فرکانس آستانه ν_0 مستقیما" با تابع کار W متناسب است .



شکل (۱–۳) . اثر فوتو الکتریک . A ، فلز؛ B ، نور؛ C ، الکترونها .

توضیح اثر فوتوالکتریک نخستین بار توسط اینشتین (۱۹۰۵) ارائه شد . او در نظریه کوانتومی خود از نور ، حدس زد که نور دارای ویژگیهای ذره مانند بوده و از کوانتاهای نوری یا فوتون با خواص زیر تشکیل شده است .

	انرژی $= h\nu$	سرعت $= c$
$\nu = \dfrac{\omega}{2\pi}$	تکانه $= \dfrac{h}{\lambda}$	جرم $= 0$

طبق نظر اینشتین ، یک الکترون با جذب یک تک فوتون انرژی کسب می‌کند ، بنابراین انرژی کمینه لازم فوتون برای آزادکردن یک الکترون عبارت است از

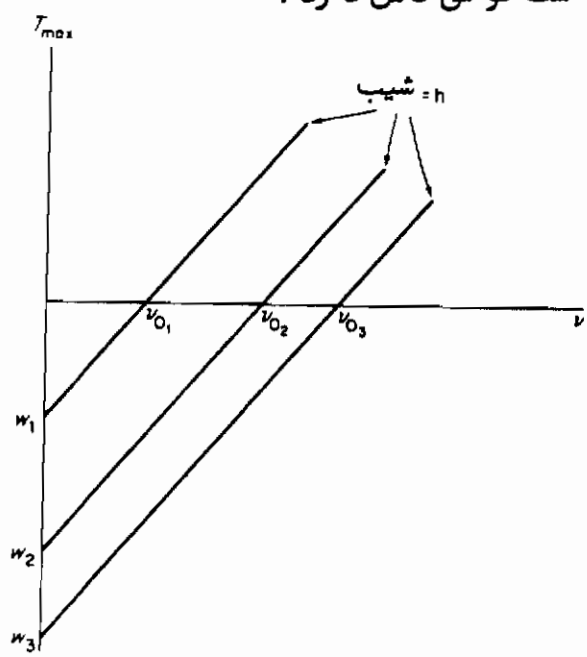
$$\varepsilon_{\min} = h\nu_0 = W \qquad (۱ - ۳۵)$$

اگر انرژی فوتون ورودی بزرگتر از $h\nu_0$ باشد ، انرژی اضافی به‌جای دیگر می‌رود ، یا احتمالا" به‌انرژی جنبشی الکترون پرتاب‌شده تبدیل می‌شود . افزایش شدت باریکه نور تابیده شده صرفا" تعداد فوتونهای ورودی را افزایش می‌دهد ، و در نتیجه ، باعث افزایش تعداد

فوتو ـ الکترونها می‌شود . انرژی جنبشی بیشینه هر الکترون عبارت است از

$$T_{max} = h\nu - W = h(\nu - \nu_0) \qquad (۳۶ - ۱)$$

این معادله ، معادله فوتوالکتریک اینشتین‌نامیده می‌شود .اگرمنحنی انرژی جنبشی مشاهده شده بیشینه نسبت به‌فرکانس فرودی را برای تعدادی از فلزات رسم کنیم ، در واقع ، یک رابطه خطی به‌دست خواهیم آورد (شکل ۱ـ۴) . تمام منحنیها دارای یک شیب مشترک h هستند ، ولی نقاط تقاطع آنها با محورها با یکدیگر تفاوت دارند که مربوط است به تابع کار خاص فلز . مقدار تجربی به‌دست آمده برای h با مقداری که از داده‌های تابش جسم سیاه برای آن به‌دست آمده است توافق کامل دارد .



شکل (۱ـ۴) . منحنی معادله فوتو الکتریک برای سه‌فلز ، که توابع‌کار و فرکانسهای آستانه آنها را نشان می‌دهد .

توجیه‌کامل نظریه اینشتین مستلزم بررسی دقیق فرایند گسیل فوتونی الکترون‌ازطریق دینامیک کوانتومی است . فرمول نسبتا" پیچیده‌ای برای توضیح جنبه‌های ظریف این پدیده به‌دست آمده است* .

---

* برای بحث در فرمول اثر فوتوالکتریک به‌کتاب
"the Quantum Theory of Radiation."3rd ed.,PP. 204-211.
Oxford Univ. Press, London and New York, 1954.
تألیف W.Heitler مراجعه کنید .

۶ـ اثر کامپتون

نظریه کوانتومی اینشتین در مورد نور می‌تواند به‌پراکندگی فوتونهای اشعه X از الکترونهای آزاد نیزاعمال شود . در عمل، الکترونها مقید به‌فلز هستند ، اما چون‌انرژیهای وابسته به‌اشعه X خیلی بزرگتر از تابع کار W است . الکترونها می‌توانند آزاد در نظر گرفته شوند .این اثر وقتی به‌طریق کلاسیکی بررسی شود ، **پراکندگی تامسون**[6] نامیده می‌شود .ازنظر کلاسیکی، تابشهای فرودی و پراکنده شده دارای یک فرکانس هستند و شدت پراکنده شده بر طبق رابطه

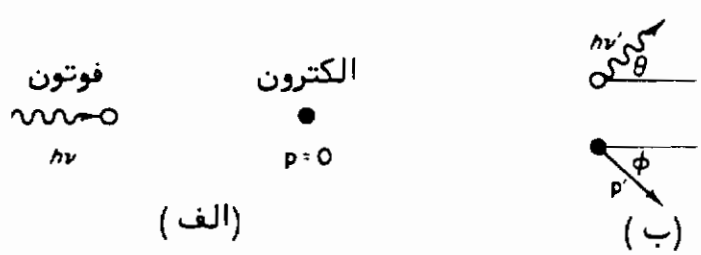
$$I \propto I_0(1 + \cos^2 \theta) \qquad (۳۷ - ۱)$$

با زاویه پراکندگی تغییر می‌کند ، که در آن I_0 شدت تابش فرودی است . وقتی اشعه X از الکترونهای یک ورقه فلزی پراکنده می‌شوند ،هیچکدام از پیشگوئیها صادق نیست . فرکانس اشعه X پراکنده شده کاهش می‌یابد و شدت آنها با فرمولی خیلی پیچیده‌تر از (۱ ـ ۳۷) داده می‌شود .

کاهش فرکانس اشعه X پراکنده شده ، نخستین‌بار توسط کامپتون (۱۹۲۳) ، با استفاده ازنظریه کوانتومی اینشتین درمورد نور ، توضیح داده شد . کامپتون این پراکندگی را به‌عنوان برخورد یک فوتون با یک الکترون آزاد که ابتدا در حال سکون بوده است ، در نظر گرفت (شکل ۱ ـ ۵) .

قوانین بقاء انرژی و تکانه ایجاب می‌کنند که

$$\begin{aligned} h\nu - h\nu' &= T && \text{(انرژی)} \\ \frac{h}{\lambda} &= \frac{h}{\lambda'}\cos\theta - p\cos\phi && \text{(تکانه در امتداد محور } x \text{ ها)} \\ \frac{h}{\lambda'}\sin\theta &= p\sin\phi && \text{(تکانه در امتداد محور } y \text{ ها)} \end{aligned} \qquad (۳۸ - ۱)$$



شکل (۱ـ۵) . سینماتیک اثر کامپتون (الف) قبل و (ب) بعداز برخورد یک فوتون و یک الکترون .

6- Thomsom

در اینجا T و p ، به‌ترتیب ، انـرژی جنبشی و تکانـه خطـی الکترون پراکنده شده‌اند . با استفاده از فرمول موجی

$$c = \nu\lambda = \nu'\lambda'$$

و رابطه نسبیتی بین تکانه و انرژی جنبشی

$$T^2 + 2Tmc^2 = p^2c^2$$

می‌توان p ، T ، ν ، ν' و ϕ را در (۱–۳۸) حذف کرد و فرمول کامپتون را به‌صورت زیـر به‌دست آورد

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \frac{h}{mc}(1 - \cos\theta) \qquad (۳۹ - ۱)$$

این فرمول طول موج پراکنده شده λ' را به‌زاویه پراکندگی فوتون، θ ، ربط می‌دهد . کمیت

$$\lambda_C = h/mc \simeq 0.024 \times 10^{-8} \quad \text{cm} \qquad (۴۰ - ۱)$$

طول موج کامپتون نامیده می‌شود . بیشینه جابه‌جایی برای پراکندگی به‌عقب ($\theta = 180°$) رخ می‌دهد که برای آن $\Delta\lambda = 2\lambda_C$.

شدت اشعه X پراکنده شده ،با فرمول کلاین ـ نیشنیا[7] (به‌جای فرمول تامسون)مطابقت می‌کند . این فرمول بر پایه الکترودینامیک کوانتومی نسبیتی بنا شده و خیلی پیچیده‌تـر از آن است که در اینجا مورد بحث قرار گیرد* .

۷ـ نظریه کوانتومی ماده

گرچه کوانتش در ابتدا در ارتباط با تابش وارد شده بود ، به‌زودی آشکار شد که مـاده نیز باید کوانتیده باشد . حتی ویژگیهای ساده‌ترین اتم ، هیدرژن ، نمی‌تواند برحسب تنها مکانیک کلاسیکی توضیح داده شود . از نظر کلاسیکی ، الکترون هیدرژنی باید روی یک مدار بیضی شکل در اطراف پروتون ،شبیه به‌حرکت سیاره‌ای ،که درآن جاذبه‌الکتروستاتیکی‌نیروی مرکز گرارا تامین می‌کند ، حرکت کند .

---

* برای بحث فرمول کلاین ـ نیشینا به‌کتاب

"the Quantum Teory of Radiation' "3rd.' P.215. Oxford Univ. Press London and New York,1954.

تألیف W.Heitler مراجعه کنید .

7- Nishina

به‌طورکلاسیکی‌کاملا" معلوم شده است که وقتی ذرات باردار دارای شتاب هستند انرژی تابشی از خود گسیل می‌دارند . الکترودینامیک کلاسیکی ثابت می‌کند که آهنگ‌گسیل عبارت است از

$$\frac{\text{انرژی}}{\text{زمان}} = \frac{2e^2a^2}{3c^3} \qquad (۴۱-۱)$$

که در آن ، e بار الکتریکی ، a شتاب و c سرعت نور است . چون الکترون هیدرژنی همیشه شتابی به‌طرف پروتون دارد ، باید از طریق فرایند تابش انرژی از دست بدهد و به‌صورت مارپیچ به‌طرف پروتون هدایت شود . با این وجود ، این فروپاشی اتمی در طبیعت رخ نمی‌دهد ، الکترون هیدرژن (به‌طور متوسط) هرگز نزدیکتراز $d \sim \frac{1}{2} \times 10^{-8}$ cm به هسته مشاهده نشده است .

یکی دیگرازنتایج نظریه‌کلاسیکی این‌است که درحالی‌که الکترون به‌طرف داخل حرکت مارپیچی دارد ، فرکانس دوران آن باید به‌طور ملایم تغییر کرده و طیف تابشی باید پیوسته باشد ، یعنی ، تمام رنگها باید به‌طور پیوسته گسیل شوند ، تجربه آشکارا نشان می‌دهد که طیف هیدرژن گسسته است ، یعنی ، شامل چند رنگ مشخص می‌باشد .

ریدبرگ[8] مشاهده کرد که طول موج خطوط طیفی در طیف تابشی هیدرژن با فرمول تجربی زیر وفق می‌دهد

$$\frac{1}{\lambda_{m,n}} = R\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right) \qquad (n, m = 1, 2, \ldots; \quad m > n) \qquad (۴۲-۱)$$

که در آن $R = ۱۰۹۶۷۷/۵۷۶\ \text{cm}^{-1}$ ثابت ریدبرگ است . توضیح مشاهدات ریدبرگ در زیر خواهد آمد .

۸ ــ فرضیه دوبروی و آزمایش داویسن ــ جرمر

وقتی نوری با طول موج معین از یک سری روزنه‌های نزدیک به‌هم عبور کند ، با خودش تداخل می‌کند و یک طرح پراش که ، درروی یک‌پرده ، به‌صورت‌تغییراتی‌درشدت نوری قابل رؤیت است ، ایجاد می‌کند . این پدیده محدود به‌نور نیست و در تمام سیستمهائی‌که‌دارای خواص موجی هستند (مثلا" ، صوت ، امواج‌آب ، و غیره) رخ می‌دهد . وقتی‌طول موج به‌سمت صفر میل می‌کند ویژگیهای موج مانندی (نورموجی)محو می‌شود و امواج مثل پرتوها رفتارمی‌کنند

8- Rydberg

(نور هندسی) . وقتی $\lambda \to 0$ ، نور، به‌جای ایجاد طرحهای تداخلی، سایه‌هایی هندسی از روزنه‌ها ایجاد می‌کند . به‌بیان دیگر، در این حد هندسی نور به‌خط مستقیم حرکت می‌کند.

لویی دوبروی، در رساله دکترای خود (۱۹۲۴) پیشنهاد کرد که ماده نیز دارای ویژگیهای موج‌مانندی است . او حدس زد که به‌هر ذره آزاد می‌توان طول موج

$$\lambda = \frac{h}{p} \qquad (۴۳-۱)$$

را نسبت داد که در آن p تکانهٔ خطی ذره و h ثابت پلانک است . چون h فوق‌العاده‌کوچک است، " طول موج دوبروی " ذرات ماکروسکوپیکی $(p = mv \sim 1)$ به‌قدری کوچک است که اثرات موجی آنها قابل تشخیص نیستند . برای ذرات میکروسکوپیکی طول موجها می‌توانند آن‌قدر بزرگ باشند که اثرات تداخلی قابل مشاهده شوند .

داویسن و جرمر یک باریکه الکترون هم انرژی را از یک بلور عبور دادند و آنهارا روی یک فیلم عکاسی ظاهرکردند . آنها دریافتند که طرح شدت به‌طورشگفت‌آوری شبیه به‌طرحی است که در پراش نوری مشاهده شده است ، و حدس زدند که باریکه الکترون به‌وسیله آرایش منظم اتمی شبکه بلوری پراشیده شده‌است . تجزیه و تحلیل‌های تجربی تایید کردندکه‌فرضیه دوبروی (۱-۴۳) واقعا" درست است . در واقع ، این رفتار موج‌مانندی الکترونها اساس کار میکروسکپ الکترونی را تشکیل می‌دهد . وجود طول موجهای بینهایت کوچک سبب‌می‌شود که قدرت تفکیک این میکروسکپها بزرگتراز قدرت تفکیک میکروسکپهای نوری متداول باشد . کانونی‌کردن توسط میدانهای الکتریکی و مغناطیسی ،به‌جای عدسی‌های‌معمولی،انجام‌میگیرد.

طبیعت کوانتومی رابطه دوبروی از حضور ثابت پلانک آشکار است . اگر h صفر می‌بود، خواص موج‌مانندی در ماده وجودنمی‌داشت . مسلما" می‌توان $h \to 0$ را به‌عنوان "حدکلاسیکی" در نظر گرفت . جالب‌توجه است که نظریه کوانتومی، همان‌طور که به‌نور خواص ذره مانندی نسبت می‌دهد ،به‌ماده نیزخواص موج‌مانندی‌نسبت می‌دهد .دوگانگی موج ــ ذره بخش عمده نظریه کوانتومی تمام انواع انرژی، خواه مادی خواه تابشی ، را تشکیل می‌دهد .

۹ ــ نظریه بوهر برای هیدرژن

خیلی پیش از فرضیه دوبروی ، بوهر (۱۹۱۳) توصیفی از طبیعت کوانتومی هیدرژن ارائه داده بود . او اصل موضوع‌های زیر را در نظر گرفت :

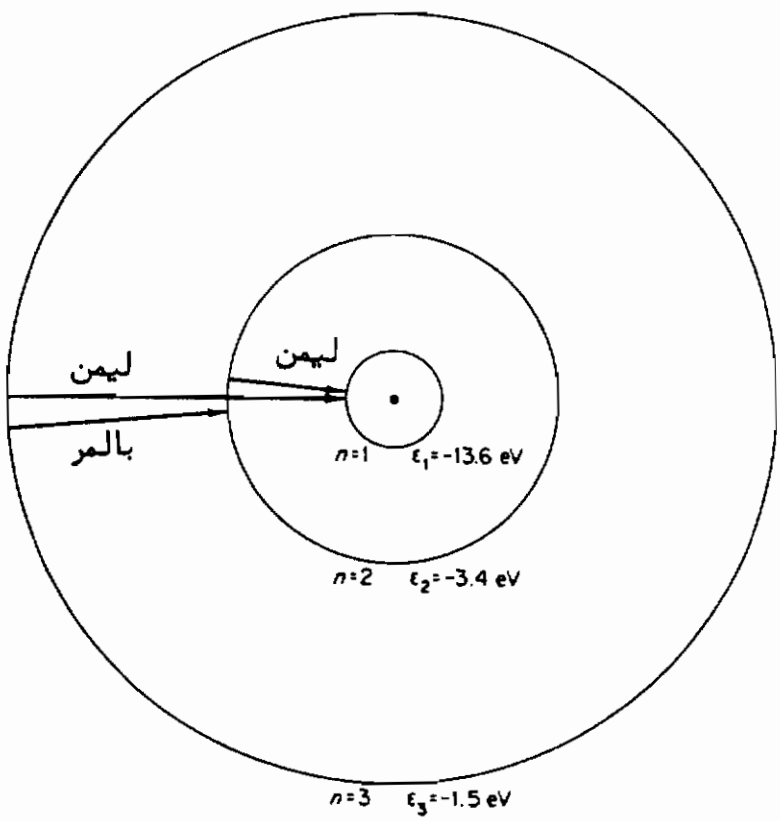
(۱) الکترونها روی مدارهای دایره‌ای حرکت می‌کنند .

(۲) مدارهای مجاز آنهائی هستند که برای آنها تکانهٔ زاویه‌ای طبق قاعده زیر کوانتیده باشد

$$L_n = mv_n r_n = n\hbar \qquad (n = 1, 2, \ldots) \qquad (۴۴-۱)$$

(۳) الکترون در روی هرکدام از این مدارها انرژی تابش نمی‌کند. بلکه، تابش فقط وقتی‌گسیل (یا جذب) می‌شود که‌الکترون ازمدارهای با انرژی بالاتر (یا پائین‌تر) به‌مدارهای با انرژی پائین‌تر (یا بالاتر) "بپرد" (شکل ۱ـ۶). کوانتای انرژی گسیل شده برابر است با اتلاف انرژی مداری.

اصل موضوع دوم می‌تواند براساس فرضیه دوبروی فهمیده شود. اگر فرض کنیم که در هر مدار موج دوبروی وابسته به‌الکترون باید با خودش "هم‌فاز" باشد، باید بخواهیم که محیط مدار مضرب صحیحی از طول موج باشد، یعنی، $2\pi r = n\lambda$



شکل (۱ـ۶). مدارهای کوانتیده در هیدرژن، طبق نظریه بوهر. چند گذار اول نشان داده شده‌اند.

اما چون $\lambda = h/p = h/mv$، داریم

$$mvr = n\hbar \qquad (۴۵-۱)$$

که همان اصل موضوع بوهر است .

انرژیهای (جنبشی به‌اضافه پتانسیل) مجاز

$$\varepsilon_n = \frac{1}{2} m v_n^2 - \frac{e^2}{r_n} \qquad (۱-۴۶)$$

می‌توانند با استفاده از قانون نیوتن برای حرکت دورانی

$$F = ma, \qquad \frac{e^2}{r_n^2} = m \frac{v_n^2}{r_n} \qquad (۱-۴۷)$$

به‌دست آیند . با حل (۱-۴۵) ، (۱-۴۶) و (۱-۴۷) برای r_n و ε_n خواهیم داشت

$$\varepsilon_n = \frac{\varepsilon_1}{n^2} \qquad (n = 1, 2, \ldots) \qquad (۱-۴۸ \text{ الف})$$

$$r_n = an^2 \qquad (۱-۴۸ \text{ ب})$$

که در آن *انرژی حالت پایه* عبارت است از

$$\varepsilon_1 = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \simeq -13.6 \quad \text{eV} \qquad (۱-۴۹ \text{ الف})$$

و *اولین شعاع بوهر* برابر است با

$$a = \frac{\hbar^2}{me^2} \simeq 0.53 \times 10^{-8} \quad \text{cm} \qquad (۱-۴۹ \text{ ب})$$

بالاخره ، با استفاده از رابطه اینشتین برای فوتون ، $\varepsilon = h\nu$ ، نتیجه می‌گیریم که فرکانسهای مشخصه طیف هیدرژن باید به‌صورت زیر باشند

$$h\nu_{mn} = \varepsilon_m - \varepsilon_n = |\varepsilon_1| \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right) \qquad (n < m) \qquad (۱-۵۰)$$

طول موجها عبارتنداز

$$\frac{1}{\lambda_{mn}} = \frac{\nu_{mn}}{c}$$

و در نتیجه

$$\frac{1}{\lambda_{mn}} = \frac{|\varepsilon_1|}{hc}\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right) \qquad (n < m) \qquad (۵۱-۱)$$

این رابطه با فرمول ریدبرگ، که در آن ثابت ریدبرگ به‌وسیله $R = |\varepsilon_1|/hc$ داده‌شده‌است، مطابقت می‌کند. خطوط گسیلی هیدرژنی در جدول (۱-۱) طبقه‌بندی شده‌اند.

جدول ۱-۱ طبقه‌بندی خطوط گسیلی هیدرژنی

سری	گذار	گستره	فرکانس (چرخه‌برثانیه)
لیمن[۹]	$m > 1 \to n = 1$	فرابنفش	$\sim 3 \times 10^{15}$
بالمر[۱۰]	$m > 2 \to n = 2$	مرئی	$\sim 6 \times 10^{14}$
پاشن[۱۱]	$m > 3 \to n = 3$	مادون قرمز	$\sim 2 \times 10^{14}$
براکت[۱۲]	$m > 4 \to n = 4$	مادون قرمز	$\sim 7 \times 10^{13}$
فوند[۱۳]	$m > 5 \to n = 5$	مادون قرمز	$\sim 5 \times 10^{13}$

۱۰- اصل تناظر

اصول موضوع بوهر در مورد تابش حاصل از اتم هیدرژن، آشکارا با الکترودینامیک کلاسیکی ناسازگار بودند. با این حال قوانین کلاسیکی برای پدیده‌های الکترومغناطیسی ماکروسکوپیکی مناسب به‌نظر می‌رسیدند. بنابراین، باید فرض کنیم که حدی وجود دارد که در آن الکترودینامیک کوانتومی با الکترودینامیک کلاسیکی متناظر است.

برای اینکه ببینیم چگونه به‌این حد می‌رسیم توجه کنیم که ذره بارداری که دارای یک حرکت دورانی یکنواخت است باید، طبق الکترودینامیک کلاسیکی، تابشی با فرکانسی برابر با فرکانس دوران خود، یعنی،

$$\nu_{rot} = \frac{v}{2\pi r} = \frac{1}{2\pi}\left(\frac{e^2}{mr^3}\right)^{1/2}, \qquad (۵۲-۱)$$

9- Lyman
10- Balmer
11- Pashen
12- Brackett
13- Pfund

یا ، با استفاده از (۱–۴۸ ب) برای مدار n ام ،

$$\nu_{rot_n} = \frac{1}{2\pi}\frac{me^4}{\hbar^3}\frac{1}{n^3} \qquad (۱-۵۳)$$

گسیل بدارد ، اما نظریه کوانتومی پیشگوئی می‌کند که فرکانس تابشی بین دو مدار مجاور n و $n+1$ عبارت است از

$$\nu_n = \frac{\varepsilon_{n+1} - \varepsilon_n}{2\pi\hbar} = \frac{|\varepsilon_1|}{2\pi\hbar}\left[\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n+1}\right]^2 \qquad (۱-۵۴)$$

به‌طوروضوح (۱–۵۳) و (۱–۵۴) باهم ناسازگارند .اما اگر (۱–۵۴) را در حد $n \to \infty$ مطالعه کنیم ، خواهیم داشت

$$\left[\frac{1}{n^2} - \frac{1}{(n+1)^2}\right] = \frac{2n+1}{n^2(n+1)^2} \xrightarrow[n\to\infty]{} \frac{2}{n^3}$$

بنابراین

$$\nu_n = \frac{|\varepsilon_1|}{2\pi\hbar}\frac{2}{n^3} = \frac{1}{2\pi}\frac{me^4}{2\hbar^2}\frac{1}{\hbar}\frac{2}{n^3} = \nu_{rot_n}$$

در حد $n \to \infty$ ، فرکانسهای گسیلی پیشگوئی شده توسط قوانین‌کلاسیکی و کوانتومی مطابقت دارند ، و می‌توانیم‌حد $n \to \infty$ را به‌عنوان حد کلاسیکی در نظر بگیریم . بنابراین از نظر کلاسیکی وقتی یک ذره باردار تابش گسیل می‌کند ، عملا" بین دو تراز کوانتومی مجاور با اعداد کوانتومی خیلی بزرگ‌گذارهایی انجام می‌دهد . اما در این نواحی فاصله نسبی ترازهای انرژی ، $\Delta\varepsilon/\varepsilon$ ، به‌قدری کوچک است که‌کوانتش غیرقابل توجه می‌شود .

۱۱ ــ خلاصه

مطالب بحث شده‌در بالا مبنای نظریه کوانتومی قدیمی را تشکیل می‌دادند . درحالی که این نظریه بعضی‌از مسائل وابسته به‌نظریه کلاسیکی ماده و تابش را حل می‌کرد ،ازبسیاری جهات کمبود داشت . تعدادی از این نقایص عبارت بودند از :

(۱) در شکل ارائه شده ، فقط می‌توانست به‌تعداد معدودی از سیستمها اعمال شود .

(۲) دلایلی که برای کوانتش ارائه می‌داد قانع‌کننده نبودند .

(۳) طوری نبود که به‌عنوان تعمیم مکانیک کلاسیکی در نظر گرفته شود و اصل تناظر همیشه روشن نبود .

نظریه قدیمی نیاز به‌این‌داشت‌که اصلاح شود ،تعمیم داده شود ، و مبنای نظری‌محکمی به‌وسیله " شرودینگر ،هایزنبرگ ،بورن ، و دیراک (۱۹۲۵ – ۱۹۲۹) برای آن طرح‌ریزی شود . در حالی که بعضی از نتایج نظریه‌های قدیم و جدید مطابقت می‌کردند ، بسیاری از آنها مطابقت نمی‌کردند . به‌عنوان مثال ، انرژیهای کوانتیده هیدرژن که به‌وسیله نظریه‌کوانتومی جدید پیشگوئی شده‌اند با نتایج بوهر (۱–۴۸ الف) مطابقت می‌کنند . اما مفهوم مدارهای کاملا" معین‌که درنظریه بوهر وجود داشت ، به‌طور آشکار یکی از اصول موضوع بنیادی‌نظریهٔ جدیدتر ، اصل عدم قطعیت هایزنبرگ ، را نقض می‌کرد .

در فصل بعد ، خلاصه‌ای از مکانیک کلاسیکی را ارائه می‌دهیم ، و نشان خواهیم دادکه چگونه می‌تواند در توسعهٔ نظریه مکانیک کوانتومی مورد استفاده قرار گیرد .

مسائل

۱–۱ کدامیک از توابع زیر برای چگالی طیفی جسم سیاه با قانون وین سازگار است ؟

(a) $\rho(\omega, T) = A\omega^3[\ln \omega - \ln T]/\sin^2 \dfrac{T}{\omega}$

(b) $\rho(\omega, T) = \omega^3 T \cos \dfrac{\omega}{T}$

(c) $\rho(\omega, T) = \omega^2[\omega^{1/\omega} e^{1/T}]^{\omega}$

(d) $\rho(\omega, T) = \dfrac{\omega^4}{T} + \omega^3$

$F(x)$ را برای حالتهای قابل قبول بیان کنید .

۱–۲ برای یک گاز فوتونی همسانگرد با چگالی انرژی $\mathscr{E}$ ،نشان دهید که انرژی عبور کرده از واحد سطح در واحد زمان ، در هرجهت ، با رابطه زیر داده می‌شود

$$\bar{J} = \tfrac{1}{4}c\mathscr{E}$$

(راهنمائی : شار متوسط در امتداد z را با انتگرال‌گیری از $J_z = J\cos\theta$ روی‌یک‌نیمکره پیدا کنید . توجه کنید که‌در یک جهت مشخص فقط نصف چگالی انرژی‌جریان‌دارد)

۱ــ۳ نشان دهید که چگالی طیفی رالی ــ جینز هم قانون استفان را نقض می‌کند و هم قانون جابه‌جایی را ، توضیح دهید که چرا چگالی طیفی پلانک از "فاجعه فرا بنفش" جلوگیری می‌کند .

۱ــ۴ در معادله (۱ــ۲۲) انتگرالها را محاسبه کنید و در نتیجه نشان دهید که $\bar{\varepsilon} = kT$.

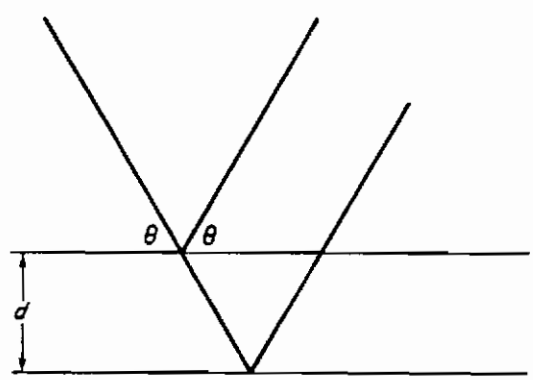
۱ــ۵ با استفاده از چگالی طیفی پلانک انتگرالی برای ثابت استفان ــ بولتزمن پیدا کنید .

۱ــ۶ فرمول کامپتون ، معادله (۱ــ۳۹) ، را آن‌طور که دربخش ۶ پیشنهاد شده‌است، اثبات کنید .

۱ــ۷ طول موج دوبروی وابسته به‌الکترون در حالت پایه هیدرژن را پیدا کنید . آنرا با طول موج دوبروی زمین در حرکت مداری آن به‌دور خورشید مقایسه کنید .

۱ــ۸ (الف) طول موج دوبروی یک نوترون حرارتی (دردمای معمولی) را ، با فرض $\varepsilon \simeq kT$ تعیین کنید .

(ب) فرض کنید که یک باریکه نوترون حرارتی روی یک مجموعه ازسطوح اتمی دریک شبکه بلوری بتابد . بر طبق نظریه براگ[14] ، تقویت بازتابی وقتی اتفاق می‌افتد که داشته باشیم $2d\sin\theta = n\lambda$ که در آن d فاصله بین سطوح ، θ زاویه بین باریکه نوترون و سطوح ، n یک عدد صحیح معرف مرتبه بازتاب ، و λ طول موج باریکه فرودی است . در مرتبهٔ اول ، $n = 1$ ، بازتاب مشاهده شده در $\theta = 30°$ رخ می‌دهد . فاصله بین‌سطوح اتمی را پیدا کنید .



شکل (۱ ــ ۷)

۱ــ۹ تحقیق کنید که سریهای لیمن و بالمر به‌ترتیب در قسمتهای فرا بنفش و مرئی طیف الکترو مغناطیسی قرار دارند .

14- Bragg

۱–۱۰ طبق اصل تناظر، وقتی یک نوسانگر کلاسیکی باردار نوری با فرکانسی برابر با فرکانس طبیعی خود، ν، گسیل می‌دارد، عملاً" چه‌کاری می‌کند؟

۱–۱۱ مقادیر نظری و تجربی ثابت ریدبرگ را باهم مقایسه کنید.

۱–۱۲ با استفاده از معادله (۱–۴۱) زمانی را که طول می‌کشد تا الکترون هیدرژن، طبق نظریه کلاسیکی، از اولین شعاع بوهر بر روی پروتون سقوط کند، تعیین کنید.

مراجع پیشنهادی

Born, M., "Atomic Physics." Hafner, New York, 1957.
Eisberg, R. M., "Fundamentals of Modern Physics." Wiley, New York, 1961.
McGervey, J. D., "Introduction to Modern Physics." Academic Press, New York, 1971.
Richtmyer, F. K., Kennard, E. H., and Lauritsen, T., "Introduction to Modern Physics." McGraw-Hill, New York, 1955.

۲

مکانیك کلاسیکی

موضوع مکانیک کوانتومی می‌تواند به‌طرق مختلفی گسترش داده شود . یک روش، که از نظر تاریخی مهم‌است ، براساس فرضیه دوبروی مبنی بر دو گانگی موجی ـ ذره‌ای ماده بنا شده است . در این روش یک معادله موج برای امواج دوبروی شبیه به‌معادله‌امواج الکترو- مغناطیسی به‌دست می‌آید . با به‌کاربردن تشابهات فیزیکی ، ویژگیهای یک ذره می‌توانند به‌خواص موجی آن مرتبط شوند ؛ لذا پراش، تداخل و اثرات تشدیدی جزء اصلی مکانیک کوانتومی ماده را تشکیل می‌دهند . ارتباط بین مکانیک کلاسیکی و مکانیک کوانتومی در این طریقه فورا" آشکار نمی‌شود .

یک روش دیگر ،به‌نظریه‌کوانتومی به‌عنوان تعمیم مستقیم دینامیک کلاسیکی نگاه‌می‌کند ، و دوگانگی موجی ـ ذره‌ای را پیامد طبیعی این نظریه می‌داند . امتیازات این روش در این است‌که تطابق با نظریه کلاسیکی را برقرار می‌کند و اجازه می‌دهد هم میدانها و هم ذرات با روش واحدی توصیف شوند . اما ، ارتباط بین نظریه‌های کوانتومی و کلاسیکی نباید در دینامیک نیوتنی ، بلکه باید در فرمولبندی هامیلتونی مکانیک کلاسیکی جستجو شود .

صورتبندی مکانیک کلاسیکی ، یعنی ، عبور از دینامیک نیوتنی به‌دینامیک لاگرانژی و بالاخره به‌دینامیک هامیلتونی ، در ذیل مورد بحث قرار می‌گیرد .

۱ ـ شکل نیوتنی مکانیک (غیرنسبیتی)

در این مرحله به‌توصیف دینامیک یک ذره نقطه‌ای تحت تأثیر نیروهای خارجی

می‌پردازیم . ذره غیرنسبیتی فرض شده است ، یعنی ، سرعت آن خیلی کوچکتر از سرعت نور است .هم‌چنین فرض شده است که نیروی خالص وارد به‌ذره غیر چرخشی است $(\nabla \times \mathbf{F} = 0)$ و در نتیجه ، مشتق از یک تابع انرژی پتانسیل $V(\mathbf{r}, t)$ است*

$$\mathbf{F} = -\nabla V \qquad (۱-۲)$$

نیروهای وابسته به‌سرعت ، مثل نیروهای وارد به‌ذرات باردار درمیدانهای مغناطیسی ، به‌زودی مورد بحث قرارخواهندگرفت .اصطکاک ، که غیرچرخشی نیست ، درپدیده‌های میکروسکوپیکی وارد نمی‌شود و از بحث فعلی ما حذف خواهد شد .

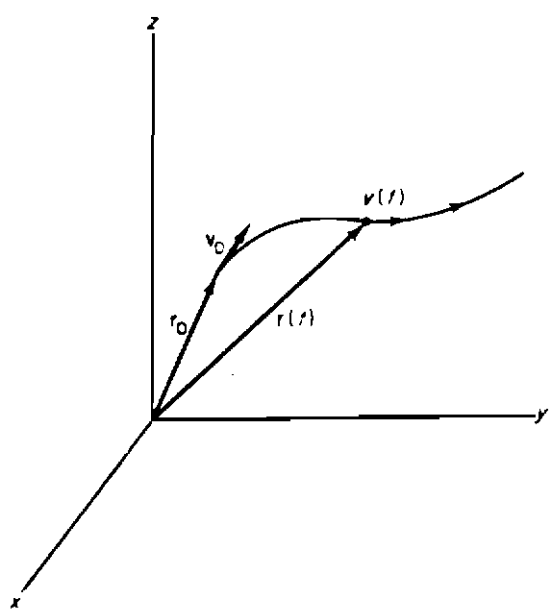
موضوع مکانیک نظری عبارت است از توصیف حرکت عمومی ذره وقتی که :

(۱) مکان و سرعت اولیه معلوم هستند ،

(۲) نیروی کل وارد به‌ذره ، $\mathbf{F}(\mathbf{r}, t)$ ، مشخص باشد .

جواب از نظر ریاضی در بردار مکانی $\mathbf{r}(t)$ که درتمام لحظات ذره را در طول مسیرش‌جایگزیده می‌کند نهفته است (شکل ۲-۱). سرعت وشتاب لحظه‌ای ذره می‌توانند با مشتق‌گیری‌به‌دست آیند ،

$$\mathbf{v}(t) = \frac{d\mathbf{r}}{dt} \quad \text{و} \quad \mathbf{a}(t) = \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} \qquad (۲-۲)$$



شکل ۲-۱ . مسیر و بردارهای مکان و سرعت یک ذره

---

* از نمادگذاری $V(\mathbf{r}, t) = V(x, y, z, t)$ استفاده خواهیم کرد .

نیروی کل وارد به‌ذره به‌وسیله قانون دوم نیوتن،

$$-\nabla V = \mathbf{F} = m\mathbf{a} = m\frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} \qquad (۳-۲)$$

یا به‌طور عمومی‌تر به‌وسیله

$$\mathbf{F} = \frac{d\mathbf{p}}{dt} \qquad (۴-۲)$$

که در آن $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$ تکانهٔ خطی ذره است، به‌شتاب آن مربوط می‌شود. معادلـه (۲ـ۳) یـک معادله دیفرانسیل برداری است و می‌تواند، وقتی شرایط اولیه

$$\mathbf{r}_0 = \mathbf{r}(0) \qquad \text{و} \qquad \mathbf{v}_0 = \mathbf{v}(0)$$

معلوم باشند، حل شود و

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}(t) \qquad (۵-۲)$$

را به‌دست دهد.

در مختصات دکارتی، از مولفه‌های (۲ـ۳) خواهیم داشت

$$\begin{aligned} m\frac{d^2x}{dt^2} &= F_x = -\frac{\partial V}{\partial x}(\mathbf{r}, t) \\ m\frac{d^2y}{dt^2} &= F_y = -\frac{\partial V}{\partial y}(\mathbf{r}, t) \\ m\frac{d^2z}{dt^2} &= F_z = -\frac{\partial V}{\partial z}(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \qquad (۶-۲)$$

با حل این دستگاه معادلات دیفرانسیل جواب سینماتیکی زیر را به‌دست خواهیم آورد

$$\mathbf{r}(t) = x(t)\mathbf{i} + y(t)\mathbf{j} + z(t)\mathbf{k} \qquad (۷-۲)$$

که در آن $\mathbf{i}$ ، $\mathbf{j}$ ، $\mathbf{k}$ بردارهای یکه‌ای هستند که به‌ترتیب در امتداد x ، y و z قرار دارند.

اگر جواب سینماتیکی معلوم باشد، می‌توان زمان t را بین $x(t)$ ، $y(t)$ و $z(t)$ حذف کرد و مسیر

$$y = y(x) \quad \text{و} \quad z = z(x) \qquad (۸-۲)$$

را که ذره در طول آن حرکت می‌کند به‌دست آورد .

ساختن چند تابع دینامیکی از متغیرهای $\mathbf{v}$ و $\mathbf{r}$ در طول حرکت ذره و مطالعه آنها آموزنده خواهد بود . به‌عنوان مثال ، مولفه‌های تکانهٔ زاویه‌ای

$$\mathbf{L} = m\mathbf{r} \times \mathbf{v} \qquad (۹-۲)$$

توابعی هستند که در مسائل مربوط به‌حرکت سیاره‌ای مفیداند . انرژی کل

$$E = \tfrac{1}{2}mv^2 + V(\mathbf{r}, t) \qquad (۱۰-۲)$$

نیز در بسیاری از مسائل اهمیت زیادی دارد . هر تابع دینامیکی که با گذشت زمان ، وقتی ذره در امتداد مسیرش به‌پیش می‌رود ، تغییر نکند **ثابت حرکت** نامیده می‌شود . هم‌چنین می‌توان گفت که تابع **پایسته** است .

وقتی یک ذره تحت اثر نیروهای پایستار (غیرچرخشی و مستقل‌از‌زمان) قرار دارد انرژی آن همیشه یک ثابت حرکت است ، یعنی ، انرژی پایسته است . از (۲-۱۰) ، با استفاده از قاعده زنجیری برای مشتق‌گیری ، خواهیم داشت

$$\frac{dE}{dt} = m\mathbf{v} \cdot \frac{d\mathbf{v}}{dt} + \mathbf{v} \cdot \nabla V = \mathbf{v} \cdot (m\mathbf{a} + \nabla V)$$

با توجه به‌قانون نیوتن ، جملهٔ داخل پرانتز صفر است و E یک ثابت حرکت است .

برای روشن‌کردن نظریه بالا ، قوانین نیوتن را به‌یک نوسانگر همسانگرد ، یعنی ، به‌ذره‌ای که به‌وسیله یک نیروی بازگرداننده خطی

$$\mathbf{F} = -k\mathbf{r} \qquad (۱۱-۲)$$

به‌طرف مبدأ کشیده می‌شود ، اعمال خواهیم کرد (k ضریب کشسانی است) . انرژی پتانسیل وابسته به‌این نیرو عبارت است از

$$V = \tfrac{1}{2}kr^2 \qquad (۱۲-۲)$$

معادلات حرکت به‌صورت زیر در می‌آیند

$$m\ddot{x} = -\frac{\partial V}{\partial x} = -kx$$

$$m\ddot{y} = -\frac{\partial V}{\partial y} = -ky \qquad (۱۳-۲)$$

و

$$m\ddot{z} = -\frac{\partial V}{\partial z} = -kz$$

فرض کنیم شرایط اولیه عبارت باشند از

$$x(0) = x_0, \qquad y(0) = y_0, \qquad z(0) = 0,$$
$$v_x(0) = v_{x_0}, \qquad v_y(0) = v_{y_0}, \qquad \text{و} \qquad v_z(0) = 0$$

جواب برای مختصه z عبارت است از

$$v_z \equiv z \equiv 0 \qquad (۱۴-۲)$$

در نتیجه، حرکت در صفحه xy باقی می‌ماند. جوابهای مربوط به x و y عبارتنداز

$$x = A_x \cos(\omega t + \phi_x), \qquad y = A_y \cos(\omega t + \phi_y) \qquad (۱۵-۲)$$

که در آن

$$A_x = \left(x_0{}^2 + \frac{v_{x_0}^2}{\omega^2}\right)^{1/2}, \qquad A_y = \left(y_0{}^2 + \frac{v_{y_0}^2}{\omega^2}\right)^{1/2}$$

$$\phi_x = \tan^{-1}\frac{v_{x_0}}{\omega x_0}, \qquad \phi_y = \tan^{-1}\frac{v_{y_0}}{\omega y_0}$$

سرعت با مشتق‌گیری از (۲-۱۵) به‌دست می‌آید.

همان‌طور که قبلاً دیدیم، انرژی

$$E = \tfrac{1}{2}mv^2 + \tfrac{1}{2}kr^2 = \tfrac{1}{2}m(v_x{}^2 + v_y{}^2 + v_z{}^2) + \tfrac{1}{2}k(x^2 + y^2 + z^2) \qquad (۱۶-۲)$$

یک ثابت حرکت است زیرا نوسانگر یک سیستم پایستار است. می‌توان ثابت کرد که مولفهٔ غیر صفر تکانه زاویه‌ای،

$$L = L_z = m(xv_y - yv_x) \qquad (۱۷-۲)$$

نیز یک ثابت حرکت است . هردو ثابت حرکت می‌توانند تحت شرایط اولیه محاسبه شده و برحسب r_0 و v_0 بیان شوند .

با فرض اینکه $v_{x_0} = 0$ و $y_0 = 0$ است ، مسئله را قدری ساده می‌کنیم . جوابهای (۲–۱۵) خواهند شد

$$x = x_0 \cos \omega t, \qquad y = \frac{v_{y_0}}{\omega} \sin \omega t \qquad (۲-۱۸)$$

و ثابتهای حرکت می‌توانند به‌صورت زیر نوشته شوند

$$E = \tfrac{1}{2} m v_{y_0}^2 + \tfrac{1}{2} k x_0^2 \qquad (۲-۱۹ \text{ الف})$$

$$L = m x_0 v_{y_0} \qquad (۲-۱۹ \text{ ب})$$

معادله مسیر با حذف متغیر زمانی از معادلات (۲–۱۸) به‌صورت زیر به‌دست می‌آید

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = 1 \qquad (۲-۲۰)$$

که در آن $a = x_0$ و $b = v_{y_0} \omega$. این مداریک بیضی ، با شکل معمولی ، است که‌قطرهای اطول و اقصرآن به‌وسیله شرایط اولیه تعیین می‌شوند . این شرایط می‌توانند ، با استفاده از (۲–۱۹ الف) و (۲–۱۹ ب) ، برحسب E و L بیان شوند .

۲ ــ معادلات لاگرانژ

دلیلی وجود ندارد که قوانین نیوتن را به‌مختصات دکارتی محدود کنیم . در واقع ، خیلی‌ازمسائل‌که درمختصات دکارتی غیرقابل حل‌هستند می‌توانند بابه‌کاربردن‌دستگاههای مختصات دیگر حل شوند . به‌عنوان مثال ، مسئله کپلر[1] که به‌ذراتی که توسط نیروی

$$\mathbf{F} = -\frac{k\mathbf{r}}{r^3} \qquad \begin{matrix} (k = GMm, & \text{گرانشی}) \\ (k = qq', & \text{الکتروستاتیکی}) \end{matrix} \qquad (۲-۲۱)$$

1- Kepler

به‌طرف مرکز نیرو کشیده می‌شوند می‌پردازد ، شامل معادلاتی به‌شکل زیراست

$$m\ddot{x} = -\frac{kx}{(x^2+y^2+z^2)^{3/2}} = F_x$$
$$m\ddot{y} = -\frac{ky}{(x^2+y^2+z^2)^{3/2}} = F_y \qquad (۲۲-۲)$$
$$m\ddot{z} = -\frac{kz}{(x^2+y^2+z^2)^{3/2}} = F_z$$

برخلاف معادلات حرکت یک نوسانگر ، این معادلات جفت‌شده هستند ،یعنی ، معادله x شامل دو متغیردیگر y و z نیز می‌باشد ،و غیره . . . .فرایند تفکیک معمولا" کارساده‌ای‌نیست. اما ، اگرمسئله در مختصات قطبی کروی، با به‌کاربردن متغیرهای r ، θ و ϕ ، بیان‌شده‌بود، معادلات حرکت ، همان‌طور که در زیر به‌طور اختصار خواهیم دید ، به‌آسانی تفکیک‌می‌شدند.

می‌توان راحتی یک صورتبندی هم‌ارز با قوانین نیوتن را که مستقل از دستگاه‌مختصات بخصوصی باشد ،حدس زد . این تعمیم ، که به‌*معادلات لاگرانژ*موسوم است ،می‌تواند برحسب مجموعه‌ای از مختصات تعمیم یافته بیان شود ؛ این مختصات جدید نیازی ندارند که ارتباط هندسی ساده‌ای بامختصات‌دکارتی داشته باشند .تنها محدودیت آنها این است که‌ازیکدیگر مستقل باشند و مکان ذره را به‌طور یکتا تعیین کنند .

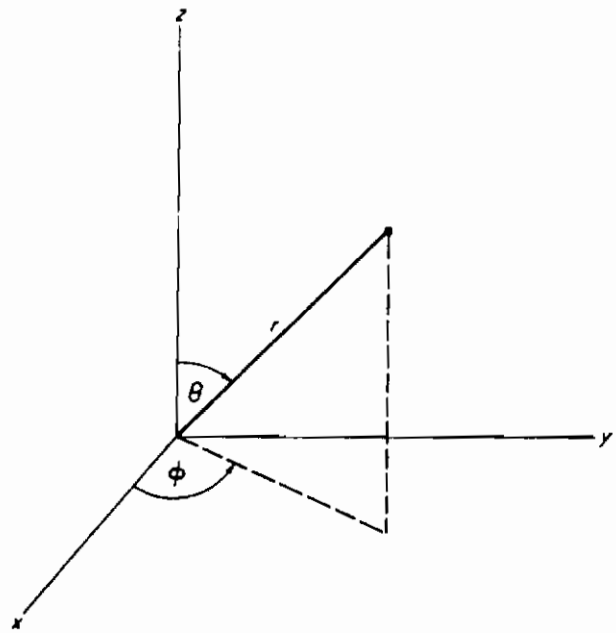
یک مجموعه مختصات تعمیم یافته می‌تواند با تبدیلی به‌شکل

$$q_j = q_j(\mathbf{r}) \qquad (j = 1, 2, 3), \qquad (۲۳-۲)$$

برحسب متغیرهای دکارتی تعریف شود . تعداد مختصات مستقل (در این حالت ۳)لازم‌برای جایگزیده‌کردن ذره ، اصطلاحا" ، *تعداد درجات آزادی* نامیده می‌شود . به‌عنوان مثال ، تبدیل به‌مختصات قطبی عبارت است از (شکل ۲-۲)

$$r = (x^2+y^2+z^2)^{1/2}$$
$$\theta = \tan^{-1}\frac{(x^2+y^2)^{1/2}}{z} \qquad (۲۴-۲)$$
$$\phi = \tan^{-1}\frac{y}{x}$$

بنابراین $q_1 = r$ ، $q_2 = \theta$ ، $q_3 = \phi$ یک مجموعه بخصوصی از مختصات تعمیم یافته است .



شکل ۲–۲. مختصات قطبی کروی

در حالی که قوانین نیوتن مستقیما" با نیروها سروکار دارند ،معادلات لاگرانژ کمیتی به‌نام *لاگرانژی* که به‌صورت

$$\mathscr{L} = T - V \qquad (۲۵-۲)$$

تعریف می‌شود وارد می‌کنند که در آن $T(q_j, \dot{q}_j)$ انرژی جنبشی برحسب مختصات و سرعتهای تعمیم‌یافته ، و $V(q_j)$ انرژی پتانسیل است .

برحسب لاگرانژی ، معادلات لاگرانژ حرکت برای مختصات تعمیم‌یافته به‌صورت

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot{q}_j} - \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial q_j} = 0 \qquad (j = 1, 2, 3, \ldots) \qquad (۲۶-۲)$$

درمی‌آیند .نحوه به‌دست‌آوردن (۲–۲۶) در کتابهای متعارف مکانیک کلاسیکی یافت می‌شود*. وقتی (۲–۲۶) حل‌شد و $q_j(t)$ ها به‌دست آمدند ، بستگی زمانی متغیرهای دکارتی می‌توانند

---

* به‌عنوان مثال کتاب

K.R. Symon,"Mechanics" 3rd ed. Ghapter 9. Addison-wesley, Reading, Massachusetts,1971. را به‌بینید .

با استفاده از تبدیل وارون تبدیل (۲–۲۳) به‌دست آیند .

در مختصات دکارتی ، لاگرانژی عبارت است از

$$\mathscr{L} = \tfrac{1}{2}m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) - V(x, y, z, t) \qquad (۲۷-۲)$$

با اعمال معادلات لاگرانژ به‌متغیر x خواهیم داشت

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot{x}}\right) - \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial x} = 0 \qquad \text{یا} \qquad m\ddot{x} = -\frac{\partial V}{\partial x} = F_x \qquad (۲۸-۲)$$

با اعمال به‌سایر متغیرهای دکارتی ، قانون دوم نیوتن را به‌طور کامل به‌دست‌خواهیم آورد .

تناظر بین معادلات لاگرانژ و قانون نیوتن وقتی روشن‌تر می‌شود که تکانهٔ تعمیم یافته وابسته به q_j را به‌صورت

$$p_j = \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot{q}_j} \qquad (۲۹-۲)$$

و نیروی تعمیم‌یافته را به‌صورت

$$F_j = -\frac{\partial V}{\partial q_j} \qquad (۳۰-۲)$$

تعریف کنیم . بعلاوه

$$\text{“}F_j\text{”} = \frac{\partial T}{\partial q_j} \qquad (۳۱-۲)$$

را به‌عنوان نیروی جنبشی یا نیروی لختی درنظر می‌گیریم . در این صورت ، معادلات‌لاگرانژ به‌شکل

$$\dot{p}_j = F_j + \text{“}F_j\text{”} \qquad (۳۲-۲)$$

در می‌آید که می‌تواند با (۲–۴) مقایسه شود .

لاگرانژی در مختصات قطبی صفحه‌ای عبارت است از

$$\mathscr{L} = \tfrac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\phi}^2) - V(r, \phi, t) \qquad (۳۳-۲)$$

با استفاده از معادلات لاگرانژ خواهیم داشت

$$\frac{d}{dt}p_r = \frac{d}{dt}(m\dot{r}) = -\frac{\partial V}{\partial r} + mr\dot{\phi}^2 \qquad (۳۴-۲)$$

و

$$\frac{d}{dt}p_\phi = \frac{d}{dt}(mr^2\dot{\phi}) = -\frac{\partial V}{\partial \phi} \qquad (۳۵-۲)$$

معادله اول تغییرات تکانهٔ شعاعی را با مولفه نیرو در امتداد شعاع به‌اضافه نیروی (گریز از مرکز) لختی برابر می‌داند. معادله دوم تغییرات تکانهٔ زاویه‌ای را به‌نیروی تعمیم یافته وابسته به‌متغیر زاویه‌ای، یعنی، گشتاور نیرو، ارتباط می‌دهد.

معادلات لاگرانژ عموماً به‌یک دستگاه معادلات دیفرانسیل مرتبه دوم جفت‌شده برای $q_j(t)$ ها منجر می‌شوند. مسئله کلاسیکی وقتی حل شده است که جوابهای این معادلات با توجه به‌شرایط اولیه مشخص به‌دست آمده باشند.

یک مثال مهم که مختصات قطبی را به‌کار می‌برد مسئله کپلر است که درارتباط بابحث مکانیک نیوتنی ارائه کردیم. پتانسیل وابسته به‌این مسئله عبارت است از

$$V = -\frac{k}{r} \qquad (۳۶-۲)$$

می‌توان بدون حل کامل مسئله ثابت کرد که، مثل حالت نوسانگر همسانگرد، در اینجا نیز حرکت صفحه‌ای است. با فرض اینکه حرکت در صفحه xy انجام می‌گیرد، لاگرانژی در مختصات قطبی خواهد شد

$$\mathscr{L} = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\phi}^2) + \frac{k}{r} \qquad (۳۷-۲)$$

و از معادلات لاگرانژ نتیجه خواهد شد

$$m\ddot{r} - mr\dot{\phi}^2 = -\frac{k}{r^2} \qquad (۳۸-۲)$$

و

$$\dot{p}_\phi = \frac{d}{dt}(mr^2\dot{\phi}) = 0 \quad \text{یا} \quad p_\phi = mr^2\dot{\phi} = L = \text{const} \qquad (۳۹-۲)$$

چون ϕ در لاگرانژی ظاهر نمی‌شود ، تکانه تعمیم یافتهٔ متناظر با آن یک ثابت حرکت‌است. مختصاتی‌که درلاگرانژی ظاهرنمی‌شوند *چرخه‌ای* یا *قابل اغماض* نامیده می‌شوند .توجه کنیم که چگونه معادلات حرکت فورا" از لاگرانژی به‌دست می‌آیند ، در صورتی که در مکانیک‌نیوتنی نخست باید تمام نیروها پیدا شوند و غالبا" پس از آن تجزیه شوند . اما ، وقتی معادلات دیفرانسیل حرکت پیدا شدند ، چگونگی به‌دست‌آمدن آنها درحل آنها تاثیر ناچیزی‌خواهد داشت .

برای مسئله کپلر ، هم‌انرژی

$$E = \frac{1}{2} m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\phi}^2) - \frac{k}{r} \qquad (۴۰-۲)$$

و هم تکانهٔ زاویه‌ای

$$L = mr^2\dot{\phi} \qquad (۴۱-۲)$$

ثابت حرکت‌اند . با استفاده از معادله (۲–۴۱) می‌توان $\dot{\phi} = L/mr^2$ را در (۲–۴۰) قرار داد و آنرا برای $\dot{r}$ حل کرد ، که نتیجه خواهد شد

$$\dot{r} = \frac{dr}{dt} = \left[\frac{2}{m}\left(E + \frac{k}{r} - \frac{L^2}{2mr^2}\right)\right]^{1/2}$$

یا

$$t = \int_0^t dt = \int_{r_0}^r \frac{dr}{\left[\frac{2}{m}\left(E + \frac{k}{r} - \frac{L^2}{2mr^2}\right)\right]^{1/2}} = I(r) \qquad (۴۲-۲)$$

با اینکه انتگرال فوق ، همان‌طور که نشان می‌دهد ، انتگرال ساده‌ای نیست ، می‌تواندبه‌شکل آشناتری تبدیل شده و محاسبه شود ، یا می‌تواند به‌روش عددی محاسبه گردد .در هرحالت (۲–۴۲) می‌تواند وارونه شود و نتیجه دهد

$$r = r(t) \qquad (۴۳-۲)$$

بالاخره ، می‌توان (۲–۴۱) را انتگرال‌گیری کرد و نتیجه گرفت

$$\phi(t) = L\int_0^t \frac{dt}{mr^2(t)} + \phi_0 \qquad (۴۴-۲)$$

وقتی $r(t)$ شناخته شده باشد می‌توان این انتگرال را محاسبه کرد .

در حالی که ممکن نیست بتوان $r(t)$ و $\phi(t)$ را به‌سادگی به‌دست آورد ، می‌توان به‌طور غیرمستقیم متغیر زمانی را حذف کرد و مسیر

$$r = r(\phi) \qquad (۴۵-۲)$$

را تعیین کرد . نتیجه کاملا" شناخته شده است و عبارت است از

$$r = \frac{a(1-\varepsilon^2)}{1+\varepsilon\cos(\phi-\phi_0)} \qquad (۴۶-۲)$$

که در آن ثابتهای هندسی به‌وسیله

$$\varepsilon = \left(1+\frac{2EL^2}{mk^2}\right)^{1/2} \quad \text{(خروج از مرکز)} \qquad (۴۷-۲)$$

و

$$a = -\frac{k}{2E} \qquad (۴۸-۲)$$

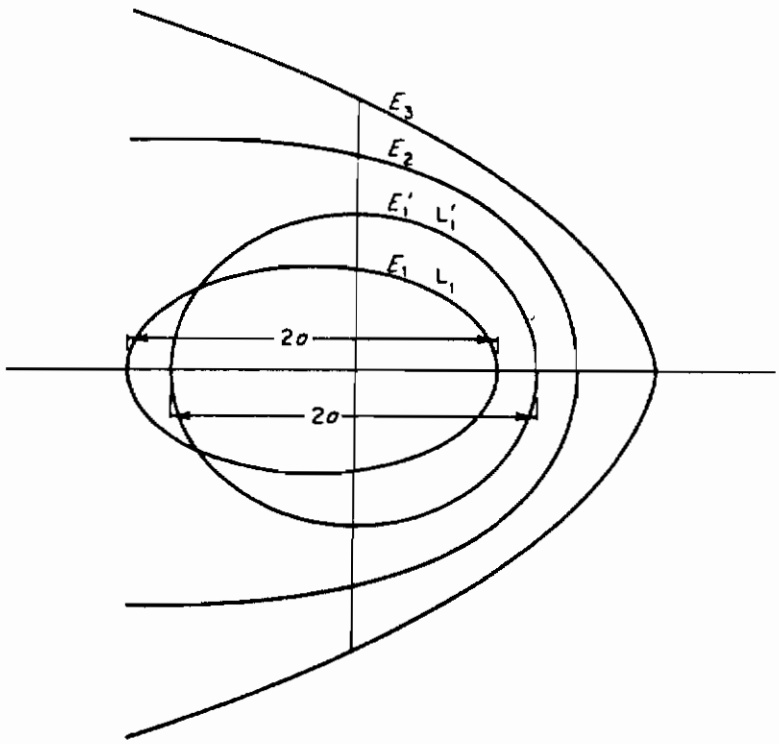
تعیین می‌شوند . مسیر یا مدار یک مقطع مخروطی است که مرکز نیرو در یکی از کانونهای آن است . مخصوصا" ، اگر $\varepsilon < 1$ $(E<0)$ باشد یک بیضی ، اگر $\varepsilon = 1$ $(E=0)$ باشد یک سهمی‌و اگر $\varepsilon > 1$ $(E>0)$ باشد یک هذلولی خواهد بود . درحالتی که مسیر بیضی است ، a نصف قطر ا طول می‌باشد و تابع E است ولی تابع L نیست .برای یک مقدارمعین‌انرژی بیضی‌های زیادی وجود دارند ،که قطراطول تمام آنها یکی است . خروج از مرکزهای آنها ، بسته‌به‌تکانه زاویه‌ای L ذره ، متفاوت‌اند . وجود مدارهای‌متفاوت برای‌یک انرژی معین درمکانیک‌کوانتومی نیز رخ می‌دهد که در آنجا به تبهگنی تعبیر می‌شود (شکل ۲-۳) .

ممکن است پتانسیلهای وابسته به‌سرعت ، مثل

$$U(q_j, \dot{q}_j t) \qquad (۴۹-۲)$$

در فرمولبندی لاگرانژی وارد شوند . برای واردکردن این پتانسیلها ، نیروهای تعمیم یافته باید به‌صورت زیر مشتق از آنها باشند

$$F_j = \frac{d}{dt}\frac{\partial U}{\partial \dot{q}_j} - \frac{\partial U}{\partial q_j} \qquad (۵۰-۲)$$



شکل ۲ــ۳ . مدارهای مربوط به پتانسیل $1/r$ برای انرژیهای مختلف . توجه‌کنیم که دو مدار بسته طوری انتخاب شده‌اند که‌انرژیهای آنها برابر باشند .

در واقع ، همان‌طور که در زیر نشان خواهیم داد ، در مورد نیروهای الکترومغناطیسی که به‌ذرات باردار وارد می‌شوند این چنین است . ما صرفا" نیاز داریم که U را همانند V در لاگرانژی مورداستفاده قرار دهیم ، یعنی ، قراردهیم $\mathscr{L} = T - U$ ، و اقدام به به‌دست‌آوردن معادلات لاگرانژ کنیم .

در مورد نیروهای الکتروستاتیکی و مغناطیسی ،می‌خواهیم‌که نیروی وارد به‌ذره‌به‌صورت

$$\mathbf{F} = q\mathbf{E} + \frac{q\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{B} \quad \text{(نیروی لورنتس)} \qquad (۵۱-۲)$$

باشد . با واردکردن پتانسیلهای برداری و نرده‌ای $\mathbf{A}$ و Φ ، به‌طوری که داشته باشیم

$$\mathbf{E} = -\nabla\Phi \qquad \text{و} \qquad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \qquad (۵۲-۲)$$

می‌توان یک تابع پتانسیل وابسته به‌سرعت به‌صورت

$$U = q\Phi(\mathbf{r}) - \frac{q}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{v} \qquad (۵۳-۲)$$

ساخت*. با کاربرد (۲ ــ ۵۰) در مورد (۲ــ۵۳)، برای مولفه x خواهیم داشت

$$F_x = -\frac{d}{dt}\frac{q}{c}A_x - q\frac{\partial\Phi}{\partial x} + \frac{q}{c}\frac{\partial}{\partial x}(\mathbf{v}\cdot\mathbf{A}) \qquad (۵۴-۲)$$

چون آهنگ تغییرات A_x، از دید ذره، عبارت است از

$$\frac{d}{dt}A_x = \frac{\partial A_x}{\partial x}\frac{dx}{dt} + \frac{\partial A_x}{\partial y}\frac{dy}{dt} + \frac{\partial A_x}{\partial z}\frac{dz}{dt} = \frac{\partial A_x}{\partial x}v_x + \frac{\partial A_x}{\partial y}v_y + \frac{\partial A_x}{\partial z}v_z$$

(۲ ــ ۵۴) خواهد شد

$$F_x = -\frac{q}{c}\left[\frac{\partial A_x}{\partial x}v_x + \frac{\partial A_x}{\partial y}v_y + \frac{\partial A_x}{\partial z}v_z\right] - q\frac{\partial\Phi}{\partial x} + \frac{q}{c}\frac{\partial}{\partial x}(\mathbf{v}\cdot\mathbf{A}) \qquad (۵۵-۲)$$

این درست مولفه x نیروی

$$\mathbf{F} = -\frac{q}{c}\mathbf{v}\cdot\nabla\mathbf{A} - q\nabla\Phi + \frac{q}{c}\nabla(\mathbf{v}\cdot\mathbf{A}) \qquad (۵۶-۲)$$

است. اگر $\mathbf{v}$ مستقل از $\mathbf{r}$ باشد، می‌توان از اتحاد

$$\nabla(\mathbf{v}\cdot\mathbf{A}) = \mathbf{v}\cdot\nabla\mathbf{A} + \mathbf{v}\times(\nabla\times\mathbf{A}) \qquad (۵۷-۲)$$

استفاده کرد، و بالاخره (۲ــ۵۶) خواهد شد

$$\begin{aligned}\mathbf{F} &= q(-\nabla\Phi) + \frac{q}{c}\mathbf{v}\times(\nabla\times\mathbf{A})\\ &= q\mathbf{E} + \frac{q}{c}\mathbf{v}\times\mathbf{B}\end{aligned}$$

که همان نتیجه موردنظر است. بنابراین، لاگرانژی الکترومغناطیسی عبارت است از

$$\mathscr{L} = T - U = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{q}{c}\mathbf{A}\cdot\mathbf{v} - q\Phi \qquad (۵۸-۲)$$

---

* این نتیجه برای میدانهای تابع زمان نیز معتبر است.

۳ـ معادلات هامیلتون

صورتبندی لاگرانژی که در بخش قبل مورد بحث قرار گرفت برای بسط موضوع مکانیک کوانتومی نامناسب است . همان‌طور که در فصل ۳ خواهیم دید ، مکانیک کوانتومی طلب می‌کند که مختصات تعمیم یافته نقشی برابر با تکانه‌های مزدوج بندادی متناظرشان بازی کنند . صورتبندی کلاسیکی مطلوب باید به‌طور صریح معادلات حرکتی را ارائه دهد که نسبت به q_j و p_j متقارن باشند . معادلات لاگرانژ (و قانون نیوتن) مختصات‌را متفاوت از تکانه‌های آنها تلقی می‌کنند ، از این نظر که فقط مشتقات زمانی تکانه‌ها در (۲ـ۳۲) ظاهر می‌شوند . صورتبندی هامیلتونی ، که قرار است در اینجا مورد بحث قرار گیرد ، تقارن مورد نظرمان بین q_j و p_j را فراهم می‌کند .

با استفاده از تبدیل

$$\mathscr{H} = \sum_{i=1}^{3} p_i \dot{q}_i - \mathscr{L} \qquad (۵۹-۲)$$

که در آن

$$p_i = \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot{q}_i} = p_i(q_1, \ldots, \dot{q}_1, \ldots) \qquad (۶۰-۲)$$

تابعی از لاگرانژی می‌سازیم . معادله (۲ـ۵۹) مثالی از تبدیل لوژاندر[2] است ،که‌دراین‌حالت تابعی موسوم به‌هامیلتونی ایجاد می‌کند به‌طوری که متغیرهای طبیعی آن به‌جای q_j و $\dot{q}_j$ که متغیرهای لاگرانژی هستند ، عبارتنداز q_j و p_j . ساختن هامیلتونی به‌کمک (۲ـ۶۰) که $\dot{q}_i$ را برحسب مختصات و تکانه‌هایی که در طرف راست (۲ـ۵۹) ظاهر می‌شوند بیان می‌کند انجام می‌گیرد . هامیلتونی همیشه برحسب q_i و p_i بیان می‌شود .

می‌توان نشان داد که برای بیشتر سیستمهایی که پتانسیل آنها مستقل از سرعت است، هامیلتونی‌همان انرژی‌کل سیستم‌است‌که برحسب مختصات وتکانه‌ها بیان شده باشد . برای چنین سیستمهایی می‌توان نوشت

$$\mathscr{H} = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r}, t) = T(p_i, q_i) + V(q_i, t) \qquad (۶۱-۲)$$

2- Legendre

که در آن T انرژی جنبشی سیستم است . هامیلتونی یک ذره در حضور نیروهای الکترو ـ مغناطیسی را می‌توان ، با انجام یک تبدیل لوژاندر روی (۲ـ۵۸) به‌صورت زیر به‌دست آورد

$$\mathscr{H} = \frac{(\mathbf{p} - q\mathbf{A}/c)^2}{2m} + q\Phi \qquad (۶۲-۲)$$

با استفاده از معادلات لاگرانژ ، می‌توان نشان داد که معادلات حرکت از هامیلتونی ، با به‌کاربردن

$$\dot{p}_j = -\frac{\partial \mathscr{H}}{\partial q_j}, \qquad \dot{q}_j = \frac{\partial \mathscr{H}}{\partial p_j}, \qquad \frac{d\mathscr{H}}{dt} = \frac{\partial \mathscr{H}}{\partial t} = -\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial t} \qquad (۶۳-۲)$$

به‌دست می‌آیند . معادلات (۲ـ۶۳) به‌نام معادلات حرکت بنداد‌ی‌هامیلتون نامیده‌می‌شوند. این معادلات نسبت به q_j و p_j متقارن‌اند* و کاملاً هم‌ارزمعادلات لاگرانژ (۲ـ۲۶) هستند . از (۲ـ۶۳) نتیجه می‌شود که اگر $\mathscr{L}$ یا $\mathscr{H}$ صریحاً به‌زمان وابسته نباشند ، هامیلتونی (و در اغلب موارد انرژی) یک ثابت حرکت است**.

علی‌رغم سه معادله دیفرانسیل مرتبه دوم لاگرانژ ، معادلات هامیلتون (۲ـ۶۳) منجر به‌شش معادله دیفرانسیل مرتبه اول جفت شده می‌شوند . معادلات اخیر باید برای $p_j(t)$ و $q_j(t)$ حل شوند . برای‌تفکیک این معادلات ،می‌توان تبدیلاتی در نظر گرفت که مختصات و تکانه‌های جدیدی به‌صورت

$$p_j' = p_j'(p_1, \ldots, q_1, \ldots), \qquad q_j' = q_j'(p_1, \ldots, q_1, \ldots) \qquad (۶۴-۲)$$

و هامیلتونی جدیدی به‌صورت

$$\mathscr{H}'(p_i', q_i') = \mathscr{H}(p_i, q_i) \qquad (۶۵-۲)$$

وارد کند . معادلات (۲ـ۶۴) لزوماً تبدیلات مختصات ساده‌ای‌که p_i و q_i رامخلوط می‌کنندنیستند ؛ بلکه محدود به‌تبدیلاتی هستیم که برای‌آنها معادلات دیفرانسیل حرکت حاصل‌از

---

* بجز یک علامت منفی ، تقارن کامل است .

** فرض خواهیم کرد . $\partial\mathscr{H}/\partial t = d\mathscr{H}/dt = 0$ مگر اینکه خلاف آن ذکر شود .

$$\dot{p}_j' = -\frac{\partial \mathscr{H}'}{\partial q_j'} \qquad \text{و} \qquad \dot{q}_j' = \frac{\partial \mathscr{H}'}{\partial p_j'} \qquad (۶۶-۲)$$

با معادلات دیفرانسیل حرکت (۲ـ۶۳) معادل باشند . چنین تبدیلاتی تبدیلات بنـدادی نامیده‌می‌شوند ، زیرا شکل معادلات‌هامیلتون را محفوظ نگاه می‌دارند . یک تغییر مختصـات ساده (تبدیل نقطه‌ای) همیشه بندادی است .

در بعضی موارد می‌توان یک تبدیـل بندادی پیدا کرد که به‌طور بسیار ساده معادلات هامیلتونی را از یکدیگر تفکیک نماید . به‌عنوان مثال ، هامیلتونی یک نوسانگر یک‌بعدی

$$\mathscr{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2, \qquad \omega = \left(\frac{k}{m}\right)^{1/2} \qquad (۶۷-۲)$$

منجر به‌معادلات حرکت جفت شدهٔ

$$\dot{p} = -m\omega^2 x, \qquad \dot{x} = \frac{p}{m} \qquad (۶۸-۲)$$

می‌شوند . اگر تبدیلات بندادی

$$p = (2m\omega p')^{1/2} \cos x', \qquad x = \left(\frac{2p'}{m\omega}\right)^{1/2} \sin x' \qquad (۶۹-۲)$$

را به‌کار بریم معادلات دیفرانسیل ساده‌تری‌به‌دست می‌آید . هامیلتونی (۲ـ۶۷) خواهدشد،

$$\mathscr{H}' = \omega p' \cos^2 x' + \omega p' \sin^2 x' = \omega p' = E \qquad (۷۰-۲)$$

و معادلات حرکت تفکیک شدهٔ

$$\dot{p}' = 0 \qquad \text{و} \qquad \dot{x}' = \omega \qquad (۷۱-۲)$$

از آن به‌دست می‌آید که جواب آنها عبارت است از

$$p' = \text{const} = \frac{E}{\omega} \qquad \text{و} \qquad x' = \omega t + \phi \qquad (۷۲-۲)$$

اگر نتایج را برحسب مختصات و تکانه‌های قدیم بیان کنیم خواهیم داشت

$$p = (2mE)^{1/2}\cos(\omega t + \phi), \qquad x = \left(\frac{2E}{m\omega^2}\right)^{1/2}\sin(\omega t + \phi) \qquad (۷۳-۲)$$

این روابط همان نتایج آشنای یک نوسانگرهستند ، با این استثناء که دامنه برحسب یک‌ثابت حرکت ، یعنی ، انرژی ، بیان شده است .

البته ، امکان تفکیک وحل ساده یک مسئله مشخص بستگی به‌تبدیلات بندادی مناسب با آن دارد . نحوه به‌دست‌آوردن چنین تبدیلی موضوع نظریه هامیلتون ــ ژاکوبی است و در اینجا ارائه نخواهد شد*.

۴ ــ کروشه‌های پواسن

برای هر تابع بندادی $G(p_i, q_i, t)$ ، معادلات حرکت می‌توانند ،با استفاده‌ازمعادلات هامیلتون به‌صورت زیر نوشته شوند

$$\begin{aligned}\frac{dG}{dt} &= \sum_{i=1}^{3}\frac{\partial G}{\partial q_i}\dot{q}_i + \frac{\partial G}{\partial p_i}\dot{p}_i + \frac{\partial G}{\partial t}\\ &= \sum_{i=1}^{3}\frac{\partial G}{\partial q_i}\frac{\partial \mathscr{H}}{\partial p_i} - \frac{\partial G}{\partial p_i}\frac{\partial \mathscr{H}}{\partial q_i} + \frac{\partial G}{\partial t}\end{aligned} \qquad (۷۴-۲)$$

کروشه پواسن دو تابع A و B را به‌صورت زیر تعریف می‌کنیم**

$$\{A, B\} = \sum_{i=1}^{3}\frac{\partial A}{\partial q_i}\frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial B}{\partial q_i}\frac{\partial A}{\partial p_i} \qquad (۷۵-۲)$$

بنابراین ، (۲ــ۷۴) می‌تواند به‌صورت

$$\frac{dG}{dt} = \{G, \mathscr{H}\} + \frac{\partial G}{\partial t} \qquad (۷۶-۲)$$

---

* به‌عنوان مثال به‌کتاب زیر مراجعه کنید

H.Goldstein'"classical Mechanics," Chapter9, Addison wesley Reading, Messachusetts 1950

** بعضی از مؤلفین نشانه [ ] را برای کروشه پواسن ترجیح می‌دهند .ما نشانه { } را به‌کار می‌بریم تا با جابه‌جاگرها که در فصل سوم‌واردخواهند شد اشتباه نشود .

خلاصه شود . برای توابع بندادی کـه صریحا" تابع زمـان نیستند $(\partial G/\partial t = 0)$ ، مشاهده می‌کنیم که اگر $\{G, \mathscr{H}\} = 0$ باشد G یک ثابت حرکت است . در واقع ، (۲ـ۷۶) عملا"تمام معادلات هامیلتون را در بر دارد ، همان‌طور کـه می‌توان با قراردادن $G = p_i$ ، $G = q_i$ ، یا $G = \mathscr{H}$ آنرا تحقیق کرد .

به‌راحتی می‌توان ثابت کرد که

$$\{q_i, p_j\} = \delta_{ij} \qquad \text{و} \qquad \{q_i, q_j\} = \{p_i, p_j\} = 0 \qquad (۷۷-۲)$$

که در آن دلتای کرونکر[3] به‌صورت زیر تعریف شده است

$$\begin{aligned} \delta_{ij} &= 1 \qquad i = j \\ \delta_{ij} &= 0 \qquad i \neq j \end{aligned} \qquad (۷۸-۲)$$

هر رابطه‌ای‌که کروشه‌های پواسن را در بر داشته باشد بایدتحت یک تبدیل بندادی تغییرـ ناپذیرباشد .این درواقع تعریف دیگری برای تبدیل بندادی‌است .معادلات (۲ـ۷۷)روابط بنیادی‌کروشه پواسن برای تمام مختصات و تکانه‌های مزدوج بندادی آنها می‌باشند . تحقیق این که مولفه‌های‌تکانه زاویه‌ای

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \qquad (۷۹-۲)$$

در روابط

$$\{L_i, L_j\} = L_k \qquad (\text{با ترتیب چرخه‌ای}\ i, j, k = x, y, z)$$

$$\{L_i, L^2\} = 0 \qquad (۸۰-۲)$$

صدق می‌کنند مشکل نخواهد بود .

از (۲ـ ۷۵) نتیجه می‌شود که مشتق یک تابع بندادی نسبت به‌یک مختصه q_j برابر است‌با کروشه پواسن آن تابع با تکانه مزدوج بندادی p_j ی آن ، یعنی ، $\partial F/\partial q_j = \{F, p_j\}$. به‌ویژه ، داریم

$$\frac{\partial F}{\partial x} = \{F, p_x\} \quad \text{یا} \quad F(x + dx, y, z) = F(x, y, z) + \{F, p_x\}\, dx \qquad (۸۱-۲)$$

3- Kronecker

تکانه بندادی p_x به‌نام مولد انتقالهای بینهایت کوچک در امتداد x موسوم است .

۵ ـ دینامیک نسبیتی

بحث را با تعمیم بعضی از نتایج قبلی پایان می‌دهیم به‌نحوی که بتوانند به ذرات نسبیتی که با سرعتهای قابل مقایسه با سرعت نور($v \lesssim c$) حرکت‌می‌کنند اعمال‌شوند، پایان می‌دهیم . قانون دوم نیوتن باید اصلاح شود و به‌صورت

$$\mathbf{F} = \dot{\mathbf{p}} \qquad (۸۲-۲)$$

نوشته شود که در آن $\mathbf{p}$ تکانه نسبیتی ذره

$$\mathbf{p} = \frac{m\mathbf{v}}{(1-(v^2/c^2))^{1/2}} \qquad (۸۳-۲)$$

و m جرم "سکون" ذره است . معادلات لاگرانژو هامیلتون دست‌نخورده‌باقی‌می‌مانند به‌شرط آنکه توابع نسبیتی مناسب

$$\mathscr{L} = -mc^2\left(1-\frac{v^2}{c^2}\right)^{1/2} - V(\mathbf{r}, t) \qquad (۸۴-۲)$$

و

$$\mathscr{H} = (p^2c^2 + m^2c^4)^{1/2} + V(\mathbf{r}, t) \qquad (۸۵-۲)$$

را به‌کار بریم . می‌توان ثابت کرد که هامیلتونی نسبیتی یک ذره باردار در یک میدان الکترومغناطیسی به‌صورت زیر است

$$\mathscr{H} = \left[\left(\mathbf{p} - \frac{q\mathbf{A}}{c}\right)^2 c^2 + m^2c^4\right]^{1/2} + q\Phi \qquad (۸۶-۲)$$

این نتیجه اخیر با اعمال کمترین جایگزینی ، که عبارت است از

$$\mathbf{p} \to \mathbf{p} - \frac{q\mathbf{A}}{c} \qquad (۸۷-۲)$$

و با به‌کارگیری $q\Phi$ به‌عنوان تابع انرژی پتانسیل معمولی به‌دست می‌آید .

می‌توان مستقیما" تحقیق کرد که اعمال معادلات لاگرانژ به (۲–۸۴) ، یا به‌طور معادل اعمال معادلات هامیلتون به (۲–۸۵) ، به‌قانون دوم نیوتن (۲–۸۲) منجر می‌شود . در حد $v/c \ll 1$ ، بسط تیلور[۴] (۲–۸۴) و (۲–۸۵) نشان می‌دهد که شکلهای نسبیتی دقیقا" به‌همتاهای غیرنسبیتی خود تبدیل می‌شوند ، به‌استثنای این واقعیت که انرژی سکون ، mc^2 ، از $\mathscr{L}$ کم می‌شود و به $\mathscr{H}$ اضافه می‌شود . اما این انرژی ثابت ، تاثیری در معادلات حرکت ندارد .

فرمولبندی کروشه هامیلتون– پواسن به‌ویژه برای تعمیم به‌نظریه کوانتومی مناسب است . خواهیم دید که چنین تعمیمی ثابت پلانک ، h ، ثابت بنیادی نظریه کوانتومی را وارد می‌کند و هم‌چنین خواهیم دید که $h \to 0$ حد کلاسیکی را ارائه می‌دهد . در فصل بعد ، چارچوب ریاضیاتی نظریه کوانتومی را به‌طریقی گسترش خواهیم داد که به‌روشنی ارتباط آنرا با مکانیک کلاسیکی نمایان سازد .

مسائل

۲–۱ با استفاده از (۲–۱۵) مستقیما" نشان دهید که $L = m(xv_y - yv_x)$ برای یک نوسانگر همسانگرد یک ثابت حرکت است .

۲–۲ جوابهای (۲–۱۸) را برحسب ثابتهای حرکت E (انرژی) و L (تکانه زاویه‌ای) بیان کنید .

۲–۳ یک سیستم N ذره‌ای که هامیلتونی آن

$$\mathscr{H} = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_j^2}{2m} + V(\mathbf{r}_j) + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j\neq i}^{N} V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$$

باشد در نظر بگیرید . فرض کنید که مختصات و تکانه‌ها توابع متناوبی با دوره تناوب τ ، از زمان باشند .

(الف) رابطه

$$\left\langle \sum_{j=1}^{N} \mathbf{r}_j \cdot \nabla_j \mathscr{H} \right\rangle = \left\langle \sum_{j=1}^{N} \mathbf{p}_j \cdot \nabla_{p_j} \mathscr{H} \right\rangle$$

4– [illegible]

را که در آن متوسط دوره‌ای به‌وسیله

$$\langle A \rangle = \int_0^\tau \frac{A\,dt}{\tau}$$

تعریف شده‌است ، ثابت کنید . (راهنمائی : از تابع $G = \sum_{j=1}^{N} \mathbf{p}_j \cdot \mathbf{r}_j$ نسبت به‌زمان مشتق بگیرید)

(ب) منفی طرف چپ نتیجه فوق ویریال کلاوسیوس[5] ، $\langle \mathfrak{B} \rangle$ ، نامیده می‌شود . نشان دهید که طرف راست برابر است با دوبرابر انرژی جنبشی . این مطلب قضیه ویریال زیر را به‌ما می‌دهد

$$-\langle \mathfrak{B} \rangle = 2\langle T \rangle$$

(ج) نشان دهید که برای یک ذره واقع در یک پتانسیل $V = Ar^n$ ، قضیه ویریال به‌شکل زیر در می‌آید

$$\langle T \rangle = \tfrac{1}{2}n\langle V \rangle$$

(د) با یک محاسبه مستقیم نشان دهید که برای یک نوسانگر ساده یک‌بعدی ،قضیه ویریال نتیجه می‌دهد $\langle T \rangle = \langle V \rangle$.

۲–۴ مورد یک ذره باردار در حضور یک میدان الکترومغناطیسی را در نظر بگیرید .

(الف با استفاده از لاگرانژی (۲–۵۸) نشان دهید که تکانهٔ مزدوج بندادی با x عبارت است از

$$p_x = mv_x + \frac{qA_x}{c}$$

(ب) هم‌چنین نشان دهید که تکانه مزدوج با زاویه سمتی ϕ عبارت است از

$$p_\phi = (\mathbf{r} \times m\mathbf{v})_z + \left(\mathbf{r} \times \frac{q}{c}\mathbf{A}\right)_z$$

(ج) یک تبدیل لوژاندر به‌لاگرانژی (۲–۵۸) اعمال کنید و هامیلتونی متناظر را به‌دست آورید .

5- Clausius

۲ــ۵ (الف) هامیلتونی وابسته به‌دوالکترون اتم هلیوم را، با درنظر گرفتن نیروی‌جاذبه آنها به‌طرف هسته و هم‌چنین دفع متقابل آنها بنویسید.
(ب) با اثبات

$$\{\mathscr{H}, \mathbf{L}\} = 0$$

نشان دهید که تکانه زاویه‌ای کل الکترونها، $\mathbf{L} = \mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2$، پایسته است.

۲ــ۶ نشان دهید که مولفه‌های تکانه زاویه‌ای در روابط زیر صدق می‌کنند

$$\{L_i, L_j\} = L_k, \qquad \{L^2, L_i\} = 0$$

۲ــ۷ (الف) معادلات لاگرانژ و معادلات هامیلتون را به‌ترتیب به (۲ــ۸۴) و (۲ــ۸۵) اعمال کنید و تحقیق کنید که به‌قانون نیوتن منجر خواهند شد.
(ب) نشان دهید که

$$\mathscr{L}_{\text{rel}} \xrightarrow[v/c \to 0]{} \mathscr{L}_{\text{nonrel}} - mc^2$$
$$\mathscr{H}_{\text{rel}} \xrightarrow[v/c \to 0]{} \mathscr{H}_{\text{nonrel}} + mc^2$$

مراجع پیشنهادی

Corben, H. C., and Stehle, P., "Classical Mechanics." Wiley, New York, 1960.
Goldstein, H., "Classical Mechanics." Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1950.
Konopinski, E. J., "Classical Descriptions of Motion." Freeman, San Franscisco, 1969.

۳

صورتبندی مکانیک کوانتومی

تجربه‌های اولیه فیزیک جدید پیشنهاد می‌کردند که برای توضیح رفتار بنیادی ماده وتابش، لازم است به‌متغیرهای بندادی، از قبیل انرژی و تکانه زاویه‌ای، فقط بعضی مقادیر مجاز را نسبت دهیم. ولی، منشاء کوانتش در حقیقت تا سال ۱۹۲۵ فهمیده نشده بود. نظریه صوری مکانیک‌کوانتومی می‌بایستی چیزی بیش ازمقادیرمشخصه‌توابع بندادی‌اندازه‌پذیر یا *مشاهده‌پذیرها* را پیشگوئی می‌کرد. این نظریه هم‌چنین می‌بایستی حاوی قالبی باشد که به‌کمک آن بتوان تمام‌اطلاعات ممکن از یک سیستم مکانیکی را به‌دست آورد. به‌تدریج که نظریه گسترش یافت تناظر بین مکانیک کلاسیکی و مکانیک کوانتومی آشکارتر شد.

شکل جدید نظریه کوانتومی به‌طرق مختلف، اما معادلی، توسط شرودینگر، هایزنبرگ و دیراک فرمولبندی شد. روشی‌که دراینجا به‌کاربرده شده است منتسب به‌دیراک‌است؛ ارتباط آن با فرمولبندی شرودینگربعدا" برقرارخواهد شد. نمایش دیراک از نظریه کوانتومی‌مستلزم اطلاعاتی در مورد فضای برداری خطی است. بخشی از ریاضیات که برای بحث مالازم‌است در زیر ارائه می‌شود.

۱ ــ بردارها در یک فضای خطی مختلط N بعدی

یک بردار در یک فضای حقیقی سه‌بعدی به‌وسیله اندازه و جهت آن مشخص می‌شود. برای نمایش بردار بهتر است که یک *پایه راست‌هنجار* که عبارت از سه‌بردار دو به‌دومتعامد به‌طول واحد است، در نظر بگیریم. معمول است که بردارهای وابسته به‌محورهای x ، y و z را به‌ترتیب با $\mathbf{i}$ ، $\mathbf{j}$ و $\mathbf{k}$ نمایش می‌دهند. این بردارها دارای خواص راست‌هنجاری زیر

می‌باشند

$$\mathbf{i}\cdot\mathbf{i}=\mathbf{j}\cdot\mathbf{j}=\mathbf{k}\cdot\mathbf{k}=1$$
$$\mathbf{i}\cdot\mathbf{j}=\mathbf{i}\cdot\mathbf{k}=\mathbf{j}\cdot\mathbf{k}=0$$

اگر فضا خطی باشد یک بردار غیرمشخص می‌تواند به‌وسیله یک ترکیب خطی از بردارهای پایه نمایش داده شود ، یعنی

$$\mathbf{a}=a_x\mathbf{i}+a_y\mathbf{j}+a_z\mathbf{k} \qquad (۱-۳)$$

کمیات a_x ، a_y ، و a_z مولفه‌های بردار $\mathbf{a}$ در پایه $\mathbf{i}$ ، $\mathbf{j}$ ، $\mathbf{k}$ نامیده می‌شوند . باید تاکید شود که در حالی که بردار $\mathbf{a}$ یکتاست ، a_x ، a_y و a_z بستگی به پایه به‌کار برده شده دارند . با استفاده از ویژگیهای بردارهای پایه خواهیم داشت

$$a_x=\mathbf{a}\cdot\mathbf{i}, \qquad a_y=\mathbf{a}\cdot\mathbf{j}, \qquad \text{و} \qquad a_z=\mathbf{a}\cdot\mathbf{k}$$

در یک پایه دیگر مولفه‌ها به‌صورت زیر خواهند بود

$$a_x'=\mathbf{a}\cdot\mathbf{i}', \qquad a_y'=\mathbf{a}\cdot\mathbf{j}', \qquad \text{و} \qquad a_z'=\mathbf{a}\cdot\mathbf{k}'$$

طول بردار به‌وسیله

$$|\mathbf{a}|=(a_x^2+a_y^2+a_z^2)^{1/2}=(a_x'^2+a_y'^2+a_z'^2)^{1/2}$$

تعریف می‌شود و درتمام پایه‌ها یکسان‌است . کمیاتی‌که در تمام پایه‌ها یکسان باشند نرده‌ای نامیده می‌شوند .

حاصل‌ضرب نقطه‌ای یا *داخلی* دوبردار نیزنرده‌ای‌است و می‌تواند برحسب مولفه‌های آنها ، با به‌کاربردن

$$\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}=a_xb_x+a_yb_y+a_zb_z=a_x'b_x'+a_y'b_y'+a_z'b_z'$$

تعیین شود .

می‌توان مولفه‌های یک بردار در یک پایه را با استفاده از یک ماتریس ستونی ،یعنی

$$\mathbf{a}=\begin{pmatrix}a_x\\a_y\\a_z\end{pmatrix}$$

نمایش داد . حاصل‌ضرب عددی $\mathbf{b}\cdot\mathbf{a}$ می‌تواند با نوشتن بردار اول به‌صورت یک ماتریس سطری و بردار دوم به‌صورت یک ماتریس ستونی نمایش داده شود . با استفاده از قاعده‌ضرب ماتریسها خواهیم داشت

$$\mathbf{b}\cdot\mathbf{a} = (b_x, b_y, b_z)\begin{pmatrix} a_x \\ a_y \\ a_z \end{pmatrix} = a_x b_x + a_y b_y + a_z b_z \qquad (۲-۳)$$

روشن است‌که یک بردارمی‌تواند یا به‌وسیله یک ماتریس سطری یا به‌وسیله یک ماتریس‌ستونی بیان شود .نمایش سطری را *الحاقی* یا *همزاد* نمایش ستونی خواهیم نامید . حاصل ضرب داخلی شامل ضرب یک ماتریس ستونی در همزاد آن ، که یک ماتریس سطری است می‌باشد . در نمادگذاری ستونی بردارهای پایه همواره به‌شکل زیراند

$$\mathbf{i} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{j} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{k} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad (۳-۳)$$

اکنون با فرض این که بردارهای موردنظر متعلق به‌یک فضای N بعدی هستند ،مطالب فوق را تعمیم می‌دهیم . یک بردار غیرمشخص می‌تواند در یک پایه راست‌هنجار ، مشابه با (۳-۱) ، به‌صورت

$$\mathbf{a} = \sum_{i=1}^{N} a^{(i)}\boldsymbol{\alpha}_i \qquad (۴-۳)$$

بسط داده‌شود که در آن روابط راست‌هنجاری عبارتنداز

$$\boldsymbol{\alpha}_i\cdot\boldsymbol{\alpha}_j = \delta_{ij} \qquad (i, j = 1, \ldots, N) \qquad (۵-۳)$$

N بردار پایه در شکل ستونی به‌صورت

$$\boldsymbol{\alpha}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{\alpha}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{\alpha}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{\alpha}_N = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad (۶-۳)$$

نمایش داده می‌شوند . بردار a برحسب مولفه‌هایش به‌صورت

$$\mathbf{a} = \begin{pmatrix} a^{(1)} \\ a^{(2)} \\ a^{(3)} \\ \vdots \\ a^{(N)} \end{pmatrix} \qquad (۷-۳)$$

نمایش داده می‌شود . مجددا" باید تاکید شود که بردار a توسط جهت و اندازه‌اش مشخص می‌شود ولی مولفه‌های آن با پایه تغییر می‌کنند . نمایش یک بردار تنها وقتی با معنی است که پایه و هم‌چنین مولفه‌های بردار در این پایه معلوم شده باشند .

چون در اینجا فضای N بعدی یک فضای مجرد است ، یک تعمیم دیگری که در نظریه کوانتومی مفیداست انجام خواهیم داد . فرض می‌کنیم بردارهای فضا مختلط باشند .به‌بیان دیگر ، لزومی ندارد که مولفه‌های یک بردار در یک پایه حقیقی باشند .بهتر است که الحاقی یک بردارستونی را ازنوبه صورت یک بردار سطری با عناصری که مزدوج مختلط عناصرمتناظر باشند تعریف کنیم . به‌بیان ریاضی داریم

$$\begin{pmatrix} a^{(1)} \\ a^{(2)} \\ \vdots \\ a^{(N)} \end{pmatrix} \text{الحاقی} = (a^{*(1)}, a^{*(2)}, \ldots, a^{*(N)}) \qquad (۸-۳)$$

نمادگذاری دیراک را وارد می‌کنیم و ماتریس ستونی را به‌صورت

$$\mathbf{a} = |a\rangle = \begin{pmatrix} a^{(1)} \\ a^{(2)} \\ \vdots \\ a^{(N)} \end{pmatrix} \qquad (۹-۳)$$

که در آن $|a\rangle$ یک بردار کت[1] نامیده می‌شود ، مختصرمی‌کنیم .به‌طریق مشابهی ، شکل‌الحاقی $|a\rangle$ را به‌صورت

$$\langle a| = (a^{*(1)}, a^{*(2)}, \ldots, a^{*(N)}) \qquad (۱۰-۳)$$

، که در آن $\langle a|$ یک بردار برا[2] نامیده می‌شود ، می‌نویسیم .حاصل‌ضرب داخلی $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$

1- Ket 2- Bra

یک نرده‌ای مختلطی است که با ضرب برای b در کت a به‌دست می‌آید ، یعنی

$$c = \mathbf{b}\cdot\mathbf{a} = \langle b|a\rangle = (b^{*(1)}, b^{*(2)}, \ldots, b^{*(N)})\begin{pmatrix} a^{(1)} \\ a^{(2)} \\ \vdots \\ a^{(N)} \end{pmatrix}$$

$$= \sum_{i=1}^{N} b^{*(i)} a^{(i)}. \qquad (۱۱-۳)$$

عبارتهای برا و کت از این واقعیت سرچشمه می‌گیرند که حاصل‌ضرب داخلی یک "برا ــ کت" یا " براکت*" تشکیل می‌دهد . توجه کنیم که ضرب داخلی دیگر یک عمل جابه‌جاپذیر نیست زیرا عوض‌کردن ترتیب عوامل ضرب منجر به‌مزدوج مختلط حاصل‌ضرب داخلی‌خواهد شد .

الحاقی بردار برا یک بردار کت است و برعکس . به‌بیان ریاضی داریم

$$|a\rangle^{\dagger} = \langle a| \qquad \text{و} \qquad \langle a|^{\dagger} = |a\rangle \qquad (۱۲-۳)$$

با استفاده از قاعده ضرب ماتریسها ، می‌توان نشان داد که الحاقی حاصل‌ضرب دو بردار برابر است با حاصل‌ضرب الحاقی‌های بردارها با ترتیب معکوس . بنابراین

$$c^{\dagger} = (\langle b|a\rangle)^{\dagger} = \langle a|b\rangle = c^{*} \qquad (۱۳-۳)$$

در نتیجه ، الحاقی یک نرده‌ای به‌طور ساده عبارت است از مزدوج مختلط آن . حاصل‌ضرب داخلی یک بردار در خودش هنجار آن بردار نامیده می‌شود و همیشه حقیقی و مثبت است ، یعنی

$$\langle a|a\rangle = \sum_{i=1}^{N} a^{*(i)} a^{(i)} = \sum_{i=1}^{N} |a^{(i)}|^2 \geqslant 0$$

با استفاده از نمادگذاری دیراک ، بسط بردار (۳ــ۴) می‌تواند درشکل کت به‌صورت

$$|a\rangle = \sum_{i=1}^{N} a^{(i)} |\alpha_i\rangle \qquad (۱۴-۳)$$

---

* براکت braket به‌معنی کروشه است .م .

یا در شکل برا به‌صورت

$$\langle a| = \sum_{i=1}^{N} \langle \alpha_i | a^{*(i)} \qquad (۱۵-۳)$$

نوشته شود . رابطه راست‌هنجاری برای بردارهای پایه به‌شکل

$$\langle \alpha_i | \alpha_j \rangle = \delta_{ij} \qquad (۱۶-۳)$$

در می‌آید ، یعنی ، حاصل‌ضرب داخلی دوبردار پایه متفاوت صفر است (تعامد) و هنجار هرکدام برابر با یک است .

۲ ــ عملگرهای خطی

یک عملگر در یک فضای مختلط N بعدی به‌وسیله عمل آن بر روی بردارهای مختلف فضا تعریف می‌شود . به‌عنوان مثال ، در رابطه

$$|b\rangle = \hat{A}|a\rangle \qquad (۱۷-۳)$$

عملگر $\hat{A}$ وقتی یکتا است که برای به‌دست‌آوردن $|b\rangle$ از هر بردار $|a\rangle$ روشی تعیین شده باشد . ما بحث خود را به‌عملگرهای خطی ، یعنی ، عملگرهائی که دارای ویژگی

$$\hat{A}[c|a\rangle + d|b\rangle] = c\hat{A}|a\rangle + d\hat{A}|b\rangle \qquad (۱۸-۳)$$

برای بردارهای دلخواه $|a\rangle$ و $|b\rangle$ و اعداد دلخواه c و d باشند محدود می‌کنیم .

با بیان بردار $|a\rangle$ در پایه $|\alpha_i\rangle$ ، عمل $|b\rangle = \hat{A}|a\rangle$ خواهد شد

$$|b\rangle = \hat{A}\sum_{i=1}^{N} a^{(i)}|\alpha_i\rangle = \sum_{i=1}^{N} a^{(i)}\hat{A}|\alpha_i\rangle \qquad (۱۹-۳)$$

اگر مولفه‌های $|b\rangle$ نیز در این پایه معلوم باشند ، اثر عملگر A یکتاست . طرفین (۳-۱۹) را در $\langle \alpha_j|$ ضرب داخلی می‌کنیم ، داریم

$$\langle \alpha_j | b \rangle = b^{(j)} = \sum_{i=1}^{N} a^{(i)} \langle \alpha_j | \hat{A} | \alpha_i \rangle \qquad (۲۰-۳)$$

N^2 عنصر

$$A_{ji} = \langle \alpha_j | \hat{A} | \alpha_i \rangle$$

عناصر ماتریس عملگر خطی $\hat{A}$ در پایه $|\alpha_i\rangle$ نامیده می‌شوند . دقت در (۳–۲۰) آشکار می‌کند که مولفه‌های $|a\rangle$ و $|b\rangle$ در رابطه ماتریسی

$$|b\rangle = \hat{A}|a\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} b^{(1)} \\ \vdots \\ b^{(N)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & \cdots & A_{1N} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ A_{N1} & \cdots & A_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a^{(1)} \\ \vdots \\ a^{(N)} \end{pmatrix} \qquad (۲۱-۳)$$

صدق می‌کنند . به‌بیان معادل ، یک عملگر خطی می‌تواند به‌صورت یک ماتریس $N \times N$ در یک پایه N بعدی معین نمایش داده شود . مجددا" ، در حالی که عملگر $\hat{A}$ مطلق است ، یعنی ، به‌وسیله عملش بر روی بردارهای فضا تعریف شده است ، عناصر آن بستگی به‌پایه‌ای دارد که برای نمایش آن به‌کار رفته است .

یک عملگر ممکن است از جهت راست روی یک کت و یا از جهت چپ روی یک برا عمل کند . عملهای متوالی توسط حاصل‌ضرب عملگرها تجلی می‌کند . ضرب عملگرها از قوانین شرکت‌پذیری و توزیع‌پذیری پیروی می‌کند ، اما لزوما" جابه‌جاپذیر نیست ، یعنی

$$\begin{aligned} (\hat{A}\hat{B})\hat{C} &= \hat{A}(\hat{B}\hat{C}) \\ \hat{A}(\hat{B} + \hat{C}) &= \hat{A}\hat{B} + \hat{A}\hat{C} \\ \hat{A}\hat{B} &\neq \hat{B}\hat{A} \end{aligned} \qquad (۲۲-۳)$$

این قواعد با نتایج مشهور ضرب ماتریسی مطابقت دارند .

ساده‌ترین عملگرها عملگریکه یا همانی است که دارای ویژگی

$$\hat{1}|a\rangle = |a\rangle$$

برای تمام بردارهای فضا است . شکل ماتریسی آن در تمام پایه‌ها عبارت است از

$$\hat{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

وارون یک عملگر، A^{-1}، اگر وجود داشته باشد*، توسط عمل

$$\hat{A}^{-1}\hat{A} = \hat{1} \qquad (۲۳-۳)$$

تعریف می‌شود. در واقع، وارون A^{-1} اثر عملگر اصلی را خنثی می‌کند.

الحاقی یک عملگر، $\hat{A}^{\dagger}$، می‌تواند به‌طرق متعددی تعریف شود. تعریفی که ما در اینجا به‌کار برده‌ایم $\hat{A}^{\dagger}$ را به‌وسیله روابط

$$\begin{aligned} |b\rangle &= \hat{A}|a\rangle \\ \langle b| &= \langle a|\hat{A}^{\dagger} \end{aligned} \qquad \text{برای هر } |a\rangle \text{ و } \langle b| \text{ ی دلخواه}$$

تعریف می‌کند. به‌بیان غیرریاضی، اگر $\hat{A}$ عملگری باشد که کت $|b\rangle$ را از کت $|a\rangle$ تولید کند، $\hat{A}^{\dagger}$ عملگری خواهد بود که برای $\langle b|$ را از برای $\langle a|$ تولید می‌کند. با به‌کار بردن این‌تعریف، می‌توان ثابت کرد که

$$\langle\alpha_i|\hat{A}|\alpha_j\rangle = (\langle\alpha_j|\hat{A}^{\dagger}|\alpha_i\rangle)^* \qquad (۲۴-۳)$$

در شکل ماتریسی، الحاقی به‌وسیله عوض‌کردن سطرها با ستونها و گرفتن مزدوج مختلط عناصر، به‌دست می‌آید.

دو عملگر مهم در مکانیک کوانتومی عبارتنداز عملگر هرمیتی و عملگر یکانی. یک عملگر هرمیتی است اگر با الحاقی خودش برابر باشد

$$\hat{A} = \hat{A}^{\dagger}$$

یا

$$\langle\alpha_i|\hat{A}|\alpha_j\rangle = (\langle\alpha_j|\hat{A}|\alpha_i\rangle)^* \qquad (۲۵-۳)$$

و یکانی خواهد بود اگر وارون آن برابر با الحاقی‌اش باشد

$$\hat{A}^{\dagger} = \hat{A}^{-1}$$

یا، با استفاده از (۳-۲۳)،

---

* عملگری که دترمینان آن (رک ۳-۲۹) صفر باشد **تکین** نامیده می‌شود و وارون ندارد.

$$\hat{A}\hat{A}^\dagger = \hat{A}^\dagger\hat{A} = \hat{1} \qquad (۲۶-۳)$$

بااستفاده‌از ویژگیهای عملگرها ، می‌توان روابط زیر را تحقیق کرد

$$(\hat{A}\hat{B})^{-1} = \hat{B}^{-1}\hat{A}^{-1}, \qquad (\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger \qquad (۲۷-۳)$$

اکنـون تاثیر یک عملگر یکانی $\hat{O}$ را روی یک مجموعه بردارهـای پایه راست‌هنجـار $|\alpha_i\rangle$ بررسی کنیم . می‌نویسیم

$$|\beta_i\rangle = \hat{O}|\alpha_i\rangle$$

یا در شکل الحاقی (برا)

$$\langle\beta_j| = \langle\alpha_j|\hat{O}^\dagger$$

با درنظرگرفتن ضرب داخلی و استفاده از تعریف عملگر یکانی ، خواهیم داشت

$$\langle\beta_j|\beta_i\rangle = \langle\alpha_j|\hat{O}^\dagger\hat{O}|\alpha_i\rangle = \langle\alpha_j|\alpha_i\rangle = \delta_{ij}$$

درنتیجه، بردارهای $|\beta_i\rangle$ یک پایه راست‌هنجار دیگـر تشکیل می‌دهند . بنابراین‌می‌توانیم $\hat{O}$ را به‌یک دوران منتسب کنیم و نتیجه بگیریم که تحت یک عمل یکانی طول تمام بردارها و جهتهای نسبی آنـها (حاصل‌ضرب داخلی) بدون تغییر می‌مانند . به‌طور عمومی‌تر، تمـام کمیتهای نرده‌ای تحت عملهای یکانی (دورانـها) ناوردا هستند .

رد یک عملگر ،که $\mathrm{Tr}\,\hat{A}$ نوشته می‌شود ، یک کمیت نرده‌ای است و ، بنابراین ، تحـت تغییر پایه ناوردا است . این‌کمیت می‌تواند با جمع عناصر قطری ماتریس وابسته به $\hat{A}$ در یک پایه محاسبه شود :

$$\mathrm{Tr}\,\hat{A} = \sum_{i=1}^{N}\langle\alpha_i|\hat{A}|\alpha_i\rangle = \sum_{i=1}^{N}A_{ii} \qquad (۲۸-۳)$$

دترمینان یک‌عملگرنیزیک‌کمیت نرده‌ای‌است‌وبا محاسبهٔ دترمینان‌ماتریس‌وابسته به‌دست‌می‌آید

$$|\hat{A}| = \det\hat{A} = \begin{vmatrix} \langle\alpha_1|\hat{A}|\alpha_1\rangle & \cdots & \langle\alpha_1|\hat{A}|\alpha_N\rangle \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \langle\alpha_N|\hat{A}|\alpha_1\rangle & \cdots & \langle\alpha_N|\hat{A}|\alpha_N\rangle \end{vmatrix} \qquad (۲۹-۳)$$

همانطور که قبلاً" خاطرنشان کردیم ، ضرب دو عملگر عموماً" جا به‌جاپذیر نیست . تفاضل بین حاصل ضرب مستقیم و جابه‌جا شده ، *جابه‌جاگر* نامیده می‌شود و از نظر ریاضی به‌صورت

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \qquad (۳۰ - ۳)$$

بیان می‌شود . نتیجه می‌شود که اگر دوعملگر جابه‌جاپذیر باشند ، جابه‌جاگر آنها صفراست . در زیر خواهیم دید که جابه‌جاگر دوعملگر یک‌نقش اساسی در گسترش ریاضیاتی مکانیک کوانتومی بازی می‌کند .

۳ ــ ویژه مقدارها و ویژه بردارها

عموماً" عمل یک عملگر روی یک بردار اندازه و جهت آنرا تغییر می‌دهد . در حال حاضر توجه خود را به‌آن گروه از بردارهائی که تحت عمل یک عملگر معین فقط بزرگی آنها تغییر می‌کند محدود می‌کنیم . این تغییر در اندازه منجر به‌ضرب بردار در یک عدد ثابت می‌شود ؛ این نکته ما را به‌نوشتن رابطه

$$\hat{A}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle \qquad (۳۱ - ۳)$$

هدایت می‌کند . شاخص پائین برای این تاکید اضافه شده است که بیش از یک بردار با این ویژگی وجود دارد . روشن خواهد شد که N بردار وجود دارد که به‌طور خطی از یکدیگر مستقل‌اند و در (۳ــ۳۱) صدق می‌کنند . بردارهای $|a_i\rangle$ و نرده‌ایهای a_i به‌ترتیب ویژه بردارها (یا ویژه کت‌ها) و ویژه مقدارهای عملگر $\hat{A}$ نامیده می‌شوند*. لذا این کمیات بردارها و مقدارهای سرشتی یا خودی عملگر می‌باشند . مجموعه ویژه مقدارها طیف عملگر نامیده می‌شود . چون (۳ــ۳۱) اندازه‌های ویژه بردارها را محدود نمی‌کند ، مناسب است که آنهارا بهنجار کنیم ، یعنی بخواهیم که

$$\langle a_i|a_i\rangle = 1$$

اگر عناصر یک عملگر در یک پایه راست‌هنجار معلوم باشند ، ویژه بردارها و ویژه

---

* ویژه بردار و ویژه‌مقدار به‌ترتیب ترجمه‌کلمات eigenvector و eigenvalue می‌باشند. پیشوند *eigen* به‌معنی "خود" یا "ویژه" در زبان آلمانی است .

مقدارها می‌توانند فورا" محاسبه شوند . به‌عنوان مثال ، نمایش ماتریسی زیر را که وابسته به‌عملگر هرمیتی $\hat{A}$ در فضای دوبعدی است در نظر بگیریم

$$\hat{A}^{\dagger} = \hat{A} = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}$$

معادله ویژه مقداری $\hat{A}|a_j\rangle = a_j|a_j\rangle$ می‌تواند در شکل ماتریسی به‌صورت

$$\begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_j^{(1)} \\ a_j^{(2)} \end{pmatrix} = a_j\begin{pmatrix} a_j^{(1)} \\ a_j^{(2)} \end{pmatrix} \qquad (j = 1, 2) \qquad (۳۲-۳)$$

بیان شود . می‌خواهیم دومولفه هریک از ویژه بردارها همراه با ویژه مقدارهای متناظر آنها را پیدا کنیم . معادله (۳ـ۳۲) معادل با یک زوج معادله همگن برای مولفه‌های $a_j^{(1)}$ و $a_j^{(2)}$ است . جوابهای غیر بدیهی($a_j^{(1)} \neq 0 \neq a_j^{(2)}$)فقط برای آن مقادیری از a_j که ریشه‌های معادله جبری

$$\det(\hat{A} - \hat{1}a_j) = \begin{vmatrix} 0 - a_j & i \\ -i & 0 - a_j \end{vmatrix} = a_j^2 - 1 = 0$$

باشند وجود دارند .ریشه‌های این معادله، $a_j = \pm 1$ ، ویژه‌مقدارهای عملگر $\hat{A}$ را تعیین می‌کنند .با قراردادن $a_1 = +1$ و $a_2 = -1$ ، مولفه‌های ویژه‌بردارهای متناظربا $|a_1\rangle$ و $|a_2\rangle$ به‌وسیله جایگزینی مستقیم در (۳ـ۳۲) به‌دست می‌آیند . همان‌طور که قبلا" متذکر شدیم ، (۳ـ۳۱) فقط جهت بردارها ، یعنی ، نسبت مولفه‌های آنها را تعیین می‌کند . این آزادی را خواهیم داشت که هرکدام از مولفه‌های (غیر صفرگ را برابر با یک قرار دهیم . با به‌کاربردن اولین ویژه مقدار $a_1 = +1$ در (۳ـ۳۲) و قراردادن $a_1^{(1)} = 1$ ، نتیجه می‌گیریم $a_1^{(2)} = -i$ و می‌نویسیم :

$$|a_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} \qquad ، \qquad a_1 = +1 \quad \text{برای}$$

ویژه‌بردار دوم به‌طریق مشابهی به‌صورت

$$|a_2\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \qquad ، \qquad a_2 = -1 \quad \text{برای}$$

به‌دست می‌آید . این بردارها در همان پایه‌ای که ماتریس اصلی نمایش داده شده است

نمایش داده شده‌اند . هنجار هرکدام از آنها برابر با ۲ می‌باشد به‌طوریکه ضرب هرکدام در $1/\sqrt{2}$ آنها را بهنجارمی‌کند . تحقیق این که دوبردار متعامداند ساده است . این نتیجه همراه با این واقعیت که ویژه مقدارها حقیقی هستند اتفاقی نیست بلکه ، همانطوری که در زیر نشان خواهیم داد ،از ویژگی هرمیتی‌بودن عملگر اولیه ناشی می‌شود .

مثال فوق ، از این نظر که تلویحا" بیان می‌کند که قبل‌از این که ویژه مقدارهای یک عملگر بتوانند معلوم شوند ، باید این عملگر در یک پایه به‌صورت ماتریس نمایش داده شود، ممکن‌است تا حدی گمراه‌کننده باشد . باید تاکید شود که ویژه‌مقدارها و ویژه‌بردارها ازمشخصات عملگراند و از پایه‌ای‌که برای محاسبه آنها به‌کارمی‌رود *مستقل‌اند* . دربعضی مواردکه نمایش ماتریسی انجام شدنی نیست ،بازهم می‌توان ویژه‌مقدارها و ویژه بردارها را بدون به‌کاربردن پایه خاصی نتیجه‌گیری کرد . این نکته ، بخصوص وقتی مهم است که تعداد ابعاد فضا ، N ، خیلی بزرگ باشد .

۴ ــ جبر ویژه مقدارها و ویژه‌بردارها برای عملگرهای هرمیتی

قضیه‌هائی که در زیر مورد بحث قرار خواهند گرفت ، کاملا" از هر پایه‌ای که ممکن است برای نمایش به‌کار رفته باشد مستقل‌اند . این قضایا در نظریه کوانتومی از بیشترین اهمیت برخوردارند و شایسته است که دانشجویان توجه خاصی به‌آنها معطوف دارند .

قضیه ۱ ــ *تمام ویژه‌مقدارهای یک عملگر هرمیتی حقیقی‌اند* .

اثبات : فرض کنیم $\hat{A}$ هرمیتی باشد و $|a_j\rangle$ و a_j به‌ترتیب معرف ویژه بردارها و ویژه‌مقدارهای آن باشند . معادله ویژه مقداری ، در شکل کت ، عبارت است از

$$\hat{A}|a_j\rangle = a_j|a_j\rangle \qquad (j = 1, \ldots, N) \qquad (۳۳-۳)$$

و در شکل برا عبارت است از

$$\langle a_k|\hat{A}^\dagger = \langle a_k|a_k^* \qquad (k = 1, \ldots, N) \qquad (۳۴-۳)$$

با ضرب داخلی (۳ــ۳۳) در $\langle a_k|$ و (۳ــ۳۴) در $|a_j\rangle$ ، و سپس کم‌کردن نتایج از یکدیگر ، خواهیم داشت

$$\langle a_k|\hat{A}^\dagger|a_j\rangle - \langle a_k|\hat{A}|a_j\rangle = (a_k^* - a_j)\langle a_k|a_j\rangle$$

چون عملگر هرمیتی فرض شده است $(\hat{A} = \hat{A}^\dagger)$ ، طرف چپ صفر می‌شود و نتیجه می‌گیریم

$$(a_k^* - a_j)\langle a_k|a_j\rangle = 0 \qquad (۳۵-۳)$$

با قراردادن $k = j$ و یادآوری این نکته که هنجار یک ویژه بردار نمی‌تواند صفر باشد ، خواهیم داشت

$$(a_j^* - a_j) = 0 \qquad \text{یا} \qquad a_j^* = a_j \qquad (۳۶-۳)$$

که تنها در صورتی برقرار است که a_j حقیقی باشد .

تعریفـ *اگر دو یا چند ویژه‌مقدار یک عملگر برابر باشند آن عملگر تبهگن است ، در غیر این‌صورت ناتبهگن است .*

قضیه ۲ـ *ویژه‌بردارهای هرعملگر هرمیتی ناتبهگن متقابلا" متعامدند .*

اثبات : با به‌کاربردن (۳ـ۳۵) و قراردادن $k \neq j$ خواهیم داشت

$$(a_k - a_j)\langle a_k|a_j\rangle = 0$$

قبلا" ثابت شد که ویژه مقدارهای a_k حقیقی‌اند $(a_k^* = a_k)$. با استفاده از این فرض که $\hat{A}$ نا تبهگن است$(a_k \neq a_j)$ برای $k \neq j$) به‌نتیجه مورد نظر خواهیم رسید

$$\langle a_k|a_j\rangle = \delta_{kj}$$

از قرارداد بهنجاربودن ویژه‌بردارها در اینجا استفاده شده است . به‌این نتیجه می‌رسیم‌که ویژه‌بردارهای یک عملگرهرمیتی‌ناتبهگن یکتا هستند و یک پایه‌راست‌هنجار تشکیل‌می‌دهند .

اگرعملگر هرمیتی تبهگن باشد ، اثبات قضیه ۲ با شکست مواجه می‌شود ؛ متعامدبودن دو ویژه‌بردار تنها در صورتی قطعی است که ویژه‌مقدارهای متناظر نابرابر باشند . در مورد تبهگنی ، تنها نیاز به‌درنظرگرفتن ویژه بردارهای وابسته به‌ویژه مقدارهای برابر (تبهگن) داریم ؛ خواص سایر ویژه‌بردارها توسط قضیه ۲ پوشش می‌شوند .

لم ۱ ـ *ویژه‌بردارهای متناظر با ویژه مقدارهای مساوی یک عملگر هرمیتی تبهگن یکتا نیستند .*

*اثبات*ـ این لم را با یک تبهگنی دوتائی مصور می‌کنیم . فرض کنیم

$$\hat{A}|a_1\rangle = a_1|a_1\rangle \qquad (۳-۳۷ \text{ الف})$$

و

$$\hat{A}|a_2\rangle = a_2|a_2\rangle \qquad (۳-۳۷ \text{ ب})$$

که در آنها $a_1 = a_2 = a$، می‌توان تحقیق کرد که ترکیبهای خطی

$$|a_1'\rangle = \alpha|a_1\rangle + \beta|a_2\rangle \qquad (۳-۳۸ \text{ الف})$$

و

$$|a_2'\rangle = \gamma|a_1\rangle + \delta|a_2\rangle \qquad (۳-۳۸ \text{ ب})$$

ویژه‌بردارهای جدیدی وابسته به‌ویژه‌مقدار a هستند . از جایگذاری مستقیم در (۳ ــ ۳۷) نتیجه می‌شود

$$\hat{A}|a_1'\rangle = \alpha\hat{A}|a_1\rangle + \beta\hat{A}|a_2\rangle = a(\alpha|a_1\rangle + \beta|a_2\rangle) = a|a_1'\rangle$$

با $|a_2'\rangle$ نیز نتیجه مشابهی به‌دست می‌آید . با تغییردادن α ، β ، γ و δ ویژه‌بردارهای جدیدی وابسته به‌ویژه مقدار a ایجاد خواهیم کرد .

لم ۲ــ همه ویژه‌بردارهای وابسته به‌ویژه‌مقدارهای مساوی نیازی ندارند که متعامد باشند.

اثبات : این نتیجه از لم ۱ حاصل می‌شود زیرا همیشه می‌توان α ، β ، γ و δ را طوری انتخاب کرد که داشته باشیم

$$\langle a_1'|a_2'\rangle \neq 0$$

بنابراین می‌توان N ویژه‌بردار برای یک عملگر هرمیتی تبهگن پیدا کرد که به‌طور خطی از یکدیگر مستقل باشند ولی متقابلا" متعامد نباشند .

لم ۳ــ حداقل یک مجموعه N ویژه بردار متعامد برای هر عملگر هرمیتی تبهگن وجود دارد .

*اثبات*ــ اثبات این مطلب اصولا" با روش ساختن صورت می‌گیرد . ما صرفا" خاطرنشان می‌کنیم که اگر $|a_1\rangle$ و $|a_2\rangle$ در (۳ــ۳۷) متعامد نباشند ، یعنی ، $\langle a_1|a_2\rangle = c \neq 0$ ، همیشه می‌توان α ، β ، γ و δ در (۳ــ۳۸) را طوری انتخاب کرد که داشته باشیم

$$\langle a_1'|a_2'\rangle = 0$$

ساختن یک مجموعه ویژه‌بردارهای راست‌هنجار ، روش راست‌هنجارکردن اشمیت[3] نامیده

3- Schmidt

می‌شود. نتایج قضایا و لم‌های پیشین در قضیه زیر خلاصه می‌شوند.

قضیه ۳ ــ هرعملگر هرمیتی دارای حداقل یک مجموعه N ویژه‌بردار راست‌هنجار است. اگر عملگرناتبهگن باشد، این مجموعه یکتاست. در غیر این‌صورت مجموعه‌های راست‌هنجار زیادی وجود دارند. (فقط ویژه‌بردارهای وابسته به‌ویژه‌مقدارهای ناتبهگن یکتا هستند.) در مورد تبهگن، باید مشخص کنیم که کدام مجموعه راست‌هنجار موردنظر ما است.

چون هر عملگر هرمیتی در یک فضای N بعدی دارای حداقل یک مجموعه N ویژه ــ برداری است که متقابلا" متعامداند، می‌توانیم این مجموعه را به‌عنوان یک پایه، که تمام بردارها و عملگرهای دیگر فضا توسط‌آن نمایش داده می‌شوند، به‌کار ببریم. پایه‌ای که از ویژه بردارهای راست‌هنجار عملگر $\hat{A}$ تشکیل شده است ویژه پایه $\hat{A}$ نامیده می‌شود. ویژه بردارها به‌صورت بردارهای پایه در می‌آیند و دارای شکل ماتریسی زیر هستند

$$|a_1\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\\0\\\vdots\end{pmatrix}, \qquad |a_2\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\\0\\0\\0\\\vdots\end{pmatrix}, \qquad |a_3\rangle = \begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\\0\\\vdots\end{pmatrix}, \quad \ldots\ldots$$

ماتریس $\hat{A}$ در ویژه پایه خودش عبارت است از

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} a_1 & 0 & 0 & \cdots & \\ 0 & a_2 & 0 & \cdots & \\ 0 & 0 & a_3 & \cdots & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ & & & & a_N \end{pmatrix}$$

این شکل $\hat{A}$ اطمینان می‌دهد که رابطه $\hat{A}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle$ در این پایه برقرار خواهد بود. تبدیل ازیک پایه غیرمشخص به‌ویژه پایه $\hat{A}$ همواره به‌قطری‌کردن ماتریس $\hat{A}$ منتهی می‌شود. این ماتریس در ویژه پایه مربوطه‌اش فقط دارای عناصر قطری است که هرکدام ازآنها یکی‌از ویژه مقدارهای $\hat{A}$ است.

۵ ــ جابه‌جاگر و مسئله ویژه‌مقدار

ویژه پایه‌های دوعملگر هرمیتی $\hat{A}$ ، $\hat{B}$ را در نظر بگیریم. نشان خواهیم داد که

جهت‌های‌نسبی ویژه‌پایه‌های $\hat{A}$ و $\hat{B}$ اساسا" به‌وسیله جابه‌جاگراین عملگرها تعیین‌می‌شوند . قضایای زیر در مورد عملگرهای هرمیتی این ارتباط را تامین می‌کند .

قضیه ۴ ــ *اگر دو عملگر دارای یک مجموعه ویژه‌بردار مشترک باشند ، جابه‌جاگر آنها صفر است . یعنی ، جابه‌جاپذیراند .*

اثبات : فرض‌کنیم یک مجموعه N بردار راست هنجار ، که با علامت $|a_i, b_i\rangle$ مشخص می‌شوند ، به‌طور همزمان ویژه‌بردارهای عملگرهای $\hat{A}$ و $\hat{B}$ وابسته به‌ویژه مقدارهای a_i و b_i باشند ، یعنی ،

$$\begin{aligned}\hat{A}|a_i, b_i\rangle &= a_i|a_i, b_i\rangle \\ \hat{B}|a_i, b_i\rangle &= b_i|a_i, b_i\rangle\end{aligned} \qquad (۳۹-۳)$$

با اعمال $\hat{B}$ روی معادله اول و $\hat{A}$ روی معادله دوم و سپس کم‌کردن آنها از یکدیگر، خواهیم داشت

$$(\hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B})|a_i, b_i\rangle = (b_i a_i - a_i b_i)|a_i, b_i\rangle = 0$$

چون طرف چپ باید برای هر ویژه‌بردار $|a_i, b_i\rangle$ صفر باشد داریم

$$(\hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B}) = [\hat{B}, \hat{A}] = 0 \qquad (۴۰-۳)$$

نتیجه : ***اگر دو عملگر جابه‌جاپذیر نباشند نمی‌توانند یک ویژه پایه مشترک داشته باشند .***

قضیه ۵ ــ *اگر دو عملگر ناتبهگن جابه‌جاپذیرباشند ،دارای‌یک مجموعه ویژه‌بردارهای مشترک خواهند بود ، یعنی هر ویژه‌بردار عملگر اول ویژه بردار عملگر دوم نیز خواهد بود.*

اثبات : فرض‌کنیم معادلات ویژه مقداری $\hat{A}$ و $\hat{B}$ به‌ترتیب عبارت باشند از

$$\hat{A}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle, \qquad \hat{B}|b_i\rangle = b_i|b_i\rangle$$

و فرض‌کنیم

$$[\hat{A}, \hat{B}] = (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) = 0$$

با تاثیردادن $\hat{B}$ روی طرف چپ معادله اول و استفاده از رابطه جابه‌جائی ، خواهیم‌داشت.

$$\hat{B}\hat{A}|a_i\rangle = \hat{A}\hat{B}|a_i\rangle$$

این رابطه می‌تواند ، با استفاده از معادله ویژه‌مقداری اول به‌صورت

$$\hat{A}\{\hat{B}|a_i\rangle\} = \hat{B}\{\hat{A}|a_i\rangle\} = a_i\{\hat{B}|a_i\rangle\}$$

نوشته شود . از مقایسه طرف‌های چپ و راست این رابطه نتیجه می‌گیریم که بردار داخل پرانتز باید حداقل متناسب با ویژه‌بردار بهنجارشدهٔ $\hat{A}$ وابسته به‌ویژه‌مقدار a_i باشد . در نتیجه می‌نویسیم

$$\hat{B}|a_i\rangle = b_i|a_i\rangle \qquad (۴۱-۳)$$

که در آن b_i به‌عنوان یک ضریب تناسب وارد شده است . چون هردو عملگر ناتبهگن فرض شده‌اند ، (۳ ــ ۴۱) ایجاب می‌کند که $|a_i\rangle$ یک ویژه‌بردار $\hat{B}$ وابسته به‌ویژه مقدار b_i نیز باشد ، و قرار می‌دهیم

$$|a_i\rangle = |b_i\rangle = |a_i, b_i\rangle$$

بدین‌طریق ثابت‌کردیم‌که ویژه‌پایه‌های یکتای دوعملگر هرمیتی جابه‌جاپذیر ،یکسان‌اند. اگر یکی از عملگرها یا هردو تبهگن باشند ، اثبات قضیه ۵ در آخرین مرحله با شکست‌مواجه می‌شود . در این‌حالت بردار $\hat{B}|a_i\rangle$ می‌تواند یک ترکیب خطی از ویژه‌بردارهای‌تبهگن $\hat{A}$ باشد .

قضیه ۶ ــ *هردو عملگر جابه‌جاپذیر دارای حداقل یک مجموعه ویژه‌بردارهای راست هنجاراند ، حتی اگر تبهگن باشند .*

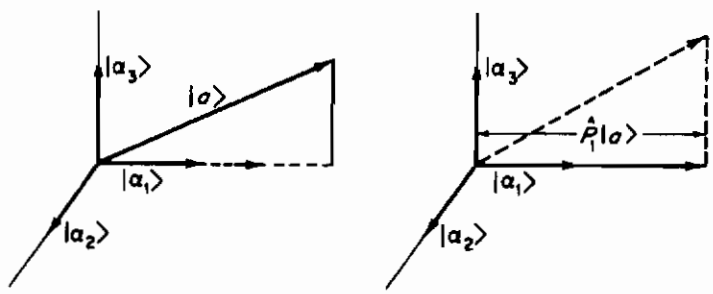
اثبات این قضیه با روش ساختن انجام می‌گیرد و در اینجا آورده نخواهد شد . کافی است بگوئیم اگر $\hat{A}$ و $\hat{B}$ جابه‌جاپذیر و تبهگن باشند ، هرکدام‌ازآنها چند ویژه پایه متمایز دارند و تمام ویژه‌پایه‌های $\hat{A}$ بر ویژه‌پایه‌های $\hat{B}$ ،منطبق نیستند . *با این وجود ، اگر دو عملگر جابه‌جاپذیر باشند ، باید حداقل یک ویژه‌پایه مشترک برای آنها وجود داشته باشد .*

قضایای ۴ تا ۶ ایجاب می‌کنند که هرمجموعه‌ای از عملگرهای جابه‌جاپذیر حداقل در یک ویژه‌پایه مشترک‌اند . ماتریسهای این عملگرها در این پایه مشترک به‌طور همزمان قطری هستند .

۶ ــ عملگر تصویرگر

اگر هر بردار دلخواه بتواند توسط یک‌پایه راست‌هنجار معین نمایش داده شود،گوئیم

که این پایه *کامل* است . به‌عنوان مثال ، بردارهای‌یکه i و j برای نمایش بردارهای واقع در فضای سه‌بعدی حقیقی *ناکامل‌اند* ؛ بردار k برای نمایش مولفه z لازم‌است . موجه به‌نظر می‌رسدکه اگربرداری متعلق به‌یک فضای N بعدی باشد ،هرمجموعه N برداریکه‌ای‌که متقابلاً متعامد باشند یک پایه کامل تشکیل می‌دهد ،یعنی ، این بردارها فضا را *ایجاد* می‌کنند .اما مفید خواهد بود که این ویژگی کامل‌بودن را به‌شکل ریاضی بیان کنیم . با هر بردار $|\alpha_j\rangle$ از یک پایه راست‌هنجار ، یک عملگر تصویرگر $\hat{P}_j$ وارد می‌کنیم .تاثیر $\hat{P}_j$ روی یک بـــردار دلخواه $|a\rangle$ در فضا عبارت‌است ازایجاد یک بردار جدید که جهت آن در جهت بردارپایه $|\alpha_j\rangle$ و بزرگی آن برابر با$\langle\alpha_j|a\rangle$باشد (شکل ۳–۱) .



شکل (۳–۱)

از نظر ریاضی ، عمل تصویرگر عبارت است از

$$\hat{P}_j|a\rangle = (\langle\alpha_j|a\rangle)|\alpha_j\rangle = |\alpha_j\rangle(\langle\alpha_j|a\rangle) \qquad (۴۲-۳)$$

با استفاده از قانون شرکت‌پذیری ، طرفهای راست و چپ به‌صورت زیر به‌هم‌مربوطند

$$\hat{P}_j|a\rangle = (|\alpha_j\rangle\langle\alpha_j|)|a\rangle$$

چون $|a\rangle$ کاملا" دلخواه است ، نتیجه می‌گیریم

$$\hat{P}_j = |\alpha_j\rangle\langle\alpha_j| \qquad (۴۳-۳)$$

ضرب یک برا از طرف چپ در یک کت به‌ضرب *دیادیک* موسوم است و متناظر با ضرب یک ماتریس سطری ،از طرف چپ ، در یک ماتریس ستونی است .اگر بردار $|\alpha_j\rangle$ دریک پایـــه دیگر به‌صورت

$$|\alpha_j\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_j^{(1)} \\ \vdots \\ \alpha_j^{(N)} \end{pmatrix} \qquad \text{و} \qquad \langle\alpha_j| = (\alpha_j^{*(1)} \cdots \alpha_j^{*(N)})$$

بیان شود ، $\hat{P}_j$ به‌وسیله ماتریس هرمیتی زیر نمایش داده می‌شود

$$\hat{P}_j = |\alpha_j\rangle\langle\alpha_j| \to \begin{pmatrix} \alpha_j^{(1)} \\ \vdots \\ \alpha_j^{(N)} \end{pmatrix} (\alpha_j^{*(1)} \cdots \alpha_j^{*(N)}) = \begin{pmatrix} \alpha_j^{(1)}\alpha_j^{*(1)} \cdots \alpha_j^{(1)}\alpha_j^{*(N)} \\ \\ \alpha_j^{(N)}\alpha_j^{*(1)} \cdots \alpha_j^{(N)}\alpha_j^{*(N)} \end{pmatrix} \quad (۴۴-۳)$$

توجه کنیم که وقتی $\hat{P}_j$ روی $|\alpha_j\rangle$ عمل کند همان بردار را ایجاد می‌کند . از طرف دیگر ، چون بردارهای دیگر پایه بر $|\alpha_j\rangle$ عموداند نتیجه عمل تصویرگر برروی آنها صفر است. بنابراین ، بردارهای پایه ، ویژه‌بردارهای $\hat{P}_j$ با ویژگی زیر می‌باشند

$$\hat{P}_k|\alpha_j\rangle = \delta_{kj}|\alpha_j\rangle \qquad (j, k = 1, \ldots, N)$$

چون این N عملگر تصویرگر دارای یک ویژه پایه مشترک $(|\alpha_j\rangle)$ هستند ، دو به‌دو جابه‌جا پذیراند (قضیه ۴) . در این پایه تمام آنها قطری هستند و دارای شکل ماتریسی زیراند

$$\hat{P}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \qquad \hat{P}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

$$\hat{P}_N = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots\ 1 \end{pmatrix}$$

بالاخره یک پایه در صورتی کامل است که هر بردار دلخواهی‌ازفضا بتواند به‌صورت

$$\begin{aligned} |a\rangle &= \sum_{j=1}^{N} (\langle\alpha_j|a\rangle)|\alpha_j\rangle \\ &= \sum_{j=1}^{N} |\alpha_j\rangle\langle\alpha_j||a\rangle = \sum_{j=1}^{N} \hat{P}_j|a\rangle \end{aligned} \quad (۴۵-۳)$$

نمایش داده شود . چون این بسط برای هـر بردار دلخواه $|a\rangle$ معتبراست ، رابطه‌کامل‌بودن (یا بستاری) خواهد شد

$$\sum_{j=1}^{N} \hat{P}_j = \sum_{j=1}^{N} |\alpha_j\rangle\langle\alpha_j| = \hat{1} \qquad (۴۶-۳)$$

همیشه فرض خواهیم کرد که N ویژه‌بردار راست‌هنجار یک عملگـر هرمیتی ، کامل‌انـد و در (۳ـ۴۶) صدق می‌کنند .

۷ ـ اصول موضوع مکانیک کوانتومی

بعداز مرور خواص لازم عملگرها و بردارها در یک فضای خطی ، اکنون می‌توان اسـاس مکانیک کوانتومی را در نمادگذاری دیراک گسترش داد .

اصل موضوع ۱* ـ به‌هرمشاهده‌پذیردینامیکی (به‌عنوان مثال ، انرژی ، تکانه خطی ،تکانه زاویه‌ای) ، در یک فضای مختلط، یک عملگر هرمیتی خطی کـه خواص آن طبیعـت کوانتومی این مشاهده‌پذیر را بیان می‌کند ، نسبت می‌دهیم . (تعداد ابعاد فضـا در همین جا مورد بحث قرار خواهد گرفت) .

بنابراین ، به‌متغیرهای دکارتی بندادی $\mathbf{r}$ و $\mathbf{p}$ وابستگی‌های زیر را نسبت می‌دهیم

$$\mathbf{r} \to \hat{\mathbf{r}} = \hat{\mathbf{r}}^\dagger, \qquad \mathbf{p} \to \hat{\mathbf{p}} = \hat{\mathbf{p}}^\dagger \qquad (۴۷-۳)$$

به‌هرتابع جبری از این متغیرها تابع عملگری متناظر آنرا نسبت می‌دهیم . به‌عنوان مثـال ، عملگرهای وابسته به‌انرژی جنبشی و مولفه‌های تکانهٔ زاویه‌ای ذره خواهند شد

$$\hat{T} = \frac{(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2)}{2m} \qquad (\hat{p}_x^2 = \hat{p}_x \hat{p}_x)$$

و

$$\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \qquad \hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z, \qquad \hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$$

---

* اصول موضوع فهرست شده لزوماً به‌ترتیب اهمیت نیامده‌اند بلکه به‌ترتیبی آمده‌اند کـه گمان می‌رود از نظر آموزشی بهترین باشد .

توجه‌کنیم که هرتابع عملگری غیرجبری باید توسط سری‌تیلور آن تعریف شود . به‌عنوان‌مثال تابع عملگری‌نمائی به‌وسیله سری بینهایت

$$e^{\hat{x}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \hat{x}^n$$

تعریف می‌شود .

اصل موضوع ۲ ــ رابطه جابه‌جائی بین عملگرهای وابسته به‌دومشاهده‌پذیر کلاسیکی از کروشه پواسن آن مشاهده‌پذیرها ، بااستفاده از تناظر

$$\{A, B\} \to \frac{[\hat{A}, \hat{B}]}{i\hbar} \qquad (۴۸-۳)$$

به‌دست می‌آید .

در زیر خواهیم دید که این تناظر به‌معادلات کوانتومی حرکتی منجر خواهد شد که با معادلات به‌دست‌آمده درمکانیک کلاسیکی سازگاراند . توجه کنیم که این تناظرصریحا" ثابت پلانک، ثابت بنیادی نظریه کوانتومی، را وارد می‌کند . اما ارتباط‌بین کروشه پواسن و جابه‌جاگر عدد موهومی i را نیز دخالت‌می‌دهد .همان‌طور که خواهیم دید بخش بزرگی از ریاضیات نظریه کوانتومی توابع مختلط‌را در بر دارد .

از روابط‌کروشه پواسن برای متغیرهای بنیادی (۲ــ۷۷) ، روابط‌جابه‌جایی بنیادی عملگرهای مکان و تکانه‌را به‌صورت زیر به‌دست خواهیم آورد

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\hat{1}\,\delta_{ij}$$
$$[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0 \qquad (x_1 = x, \quad x_2 = y, \quad x_3 = z) \qquad (۴۹-۳)$$

نتیجه می‌شود که اگر کروشه پواسن دومشاهده‌پذیر صفر باشد ، جابه‌جاگر متناظر صفر است و عملگرها جابه‌جاپذیراند .

اصل موضوع ۳ــ مقادیر کوانتومی مجاز هر مشاهده‌پذیر به‌وسیله ویژه مقدارهای عملگر متناظر با آن تعیین می‌شوند . هر اندازه‌گیری از سیستم به‌یکی از این مقادیر منجر خواهد شد .

به‌عنوان مثال ، فرض کنیم عملگر $\mathscr{H}$ متناظر با هامیلتونی (انرژی) سیستم باشد . هر اندازه‌گیری انرژی منجر به‌یکی از ویژه مقدارهای $\mathscr{H}$ ، که آنرا ε_i می‌نامیم ، خواهد شد.

بنابراین به‌محض اینکه ویژگیهای عملگر $\hat{A}$ ، وابسته به‌یک مشاهده‌پذیر ، معلوم شدند ، ویژه مقدارهای a_i مقادیر کوانتیده این مشاهده‌پذیر را تعیین می‌کنند . چون این ویژه مقدارها مستقیما" قابل اندازه‌گیری هستند ، باید حقیقی باشند . طبیعت هرمیتی عملگرهای منتسب به‌مشاهده‌پذیرها حقیقی‌بودن این ویژه مقدارها را تضمین می‌کند (قضیه۱) .

اصل موضوع ۴ــ حالت هرسیستم فیزیکی به‌وسیله یک *بردار حالت با طول واحد* دریک فضای مختلط مشخص می‌شود . بعلاوه ، اگر سیستم به‌وسیله یک بردار $|\beta\rangle$ مشخص شده باشد و یک اندازه‌گیری از یک مشاهده‌پذیر $\hat{A}$ انجام گیرد ، در این صورت *احتمال* مشاهده سیستم با مقدار مشخصه a_i به‌وسیله

$$\mathscr{P}_\beta(a_i) = |\langle a_i|\beta\rangle|^2 \leqslant 1 \qquad (\langle\beta|\beta\rangle = 1) \qquad (۵۰-۳)$$

داده می‌شود .

اصل موضوع ۴ ، از این نظر که دقتی را که با آن می‌توانیم حالت یک سیستم مکانیکی را تشریح کنیم محدود می‌کند ، بسیار جالب است . معادله (۳ــ۵۰) ایجاب می‌کند که جنبه احتمالاتی سیستم به‌وسیلهٔ جهت‌گیری نسبی بردارحالت نسبت به‌ویژه‌بردارهای‌مختلف عملگرهای متناظر با مشاهده‌پذیرها تعیین شود . توجه کنیم که احتمالات شامل کمیتهای نرده‌ای (حاصل ضرب‌های داخلی) هستند و بنابراین از هر پایه‌ای که برای نمایش به‌کار می‌رود مستقل‌اند . با جمع بندی روی تمام مقادیر ممکن a_i ، می‌نویسیم

$$\sum_i \mathscr{P}_\beta(a_i) = \sum_i |\langle a_i|\beta\rangle|^2$$
$$= \sum_i \langle\beta|a_i\rangle\langle a_i|\beta\rangle = \langle\beta|\left\{\sum_i |a_i\rangle\langle a_i|\right\}|\beta\rangle$$

با فرض اینکه ویژه‌پایه $\hat{A}$ کامل است ، $\sum_i |a_i\rangle\langle a_i| = \hat{1}$ ، خواهیم داشت

$$\sum_i \mathscr{P}_\beta(a_i) = \langle\beta|\beta\rangle = 1$$

بنابراین ، شرط بهنجاربودن بردار حالت $|\beta\rangle$ منجر به‌*بهنجاربودن احتمال* می‌شود .

یک طریقه دیگر تعبیر جنبه‌های احتمالاتی نظریه کوانتومی این است که فرض کنیم سیستم مورد مطالعه عملا" از بسیاری زیر سیستمهای کوانتومی میکروسکوپیکی یکسان تشکیل شده است . اگر سیستم به‌وسیله $|\beta\rangle$ مشخص شده باشد ،

$$\mathscr{P}_\beta(a_i) = |\langle a_i|\beta\rangle|^2 \qquad (۵۱-۳)$$

می‌تواند به‌عنوان کسری از زیر سیستمها با مقدار مشخصه a_i تعبیر شود .

میانگین یا مقدار *قابل انتظار* چند اندازه‌گیری از یک مشاهده‌پذیر $\hat{A}$ ، وقتی سیستم به‌وسیله $|\beta\rangle$ مشخص شده باشد ، با

$$\overline{A_\beta} = \sum_i \mathscr{P}_\beta(a_i)a_i / \sum_i \mathscr{P}_\beta(a_i) \qquad (۵۲-۳)$$

داده می‌شود . چون احتمال بهنجارشده فرض شده است ، مخرج برابر است با یک . توجه کنیم که این مقدار قابل انتظار ، برای a_i ی حقیقی ، یعنی برای عملگرهای هرمیتی،همیشه حقیقی است .

بهتر است که مقدار قابل انتظار را به‌صورت زیر بنویسیم

$$\overline{A_\beta} = \sum_i \mathscr{P}_\beta(a_i)a_i = \sum_i (\langle\beta|a_i\rangle)(\langle a_i|\beta\rangle)a_i = \sum_i \langle\beta|a_i|a_i\rangle\langle a_i|\beta\rangle$$

اما ، چون $\hat{A}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle$ ، خواهیم داشت

$$\overline{A_\beta} = \sum_i \langle\beta|\hat{A}|a_i\rangle\langle a_i|\beta\rangle = \langle\beta|\hat{A}\left\{\sum_i |a_i\rangle\langle a_i|\right\}|\beta\rangle$$

با فرض کامل‌بودن ویژه پایه $\hat{A}$ ، $\sum_i |a_i\rangle\langle a_i| = \hat{1}$ ، مقدار قابل انتظار در نهایت خواهد شد

$$\overline{A_\beta} = \langle\beta|\hat{A}|\beta\rangle$$

از این به‌بعد نمادگذاری زیر را می‌پذیریم

$$\overline{A_\beta} = \langle A\rangle_\beta = \langle\beta|\hat{A}|\beta\rangle \qquad (۵۳-۳)$$

مقدار قابل انتظار یک مشاهده‌پذیر $\hat{A}$ در حالت $|\beta\rangle$ به‌وسیله ساختن " ساندویچی " از بردارهای حالت برا و کت ، که عملگردر وسط‌آنها قرار دارد ، به‌دست می‌آید .

برای‌تشریح‌میزان‌انحراف یک‌اندازه‌گیری‌کاتوره‌ای از مقدار قابل انتظار ، عدم قطعیت یا انحراف ریشه میانگین مربعی یک اندازه‌گیری A (وقتی سیستم با $|\beta\rangle$ مشخص شده است) را به‌وسیله

$$\begin{aligned}\Delta A_\beta &= [\langle\beta|(\hat{A}-\langle A\rangle_\beta)^2|\beta\rangle]^{1/2}\\ &= [\langle\beta|\hat{A}^2|\beta\rangle - 2\langle A\rangle_\beta\langle\beta|\hat{A}|\beta\rangle + \langle A\rangle_\beta{}^2]^{1/2}\\ &= [\langle A^2\rangle_\beta - \langle A\rangle_\beta{}^2]^{1/2}.\end{aligned} \qquad (۵۴-۳)$$

تعریف می‌کنیم . عدم قطعیت عبارت است از ریشه دوم تفاضل بین میانگین مربعی و مربع میانگین $\hat{A}$.

اصل موضوع ۵*ـ اگر بردار حالت سیستمی بر ویژه‌بردار $|a_i\rangle$ ی مربوط به‌عملگر $\hat{A}$ منطبق باشد، می‌گوئیم که سیستم در ویژه حالت عملگر $\hat{A}$ قرار دارد . احتمال اینکه یک اندازه‌گیری منجر به‌مقدار a_i برای مشاهده‌پذیر $\hat{A}$ شود برابر با یک است

$$|\langle a_i|\beta\rangle|^2 = |\langle a_i|a_i\rangle|^2 = 1$$

مقدار قابل انتظار $\hat{A}$ در یکی از ویژه حالتهای آن ، به‌طور بدیهی ، عبارت است از

$$\langle A\rangle_i = \langle a_i|\hat{A}|a_i\rangle = a_i$$

بعلاوه چون**

$$\hat{A}^2|a_i\rangle = \hat{A}\hat{A}|a_i\rangle = a_i{}^2|a_i\rangle$$

نتیجه می‌گیریم که عدم قطعیت اندازه‌گیری باید برابر باشد با

$$\langle A^2\rangle_i - \langle A\rangle^2 = a_i{}^2 - a_i{}^2 = 0$$

وقتی سیستمی در یک ویژه حالت یک مشاهده‌پذیر عملگری قرار دارد ، گفته می‌شود که این مشاهده‌پذیر بندادی *کاملا*" معین یا دقیق است .

عدم‌قطعیت‌های وابسته به‌اندازه‌گیریهای همزمان دومشاهده‌پذیر $\hat{A}$ و $\hat{B}$ با جابه‌جاگر عملگرها رابطه دارد . اگر $\hat{A}$ و $\hat{B}$ جابه‌جاپذیر باشند ، از قضیه ۶ نتیجه می‌شود که دارای

---

* این یک اصل موضوع جدید نیست ، بلکه اساسا" از اصل موضوع ۴ نتیجه می‌شود .به‌خاطر اهمیت آن ، ما آنرا جداگانه شماره‌گذاری کرده‌ایم .

** رابطه $\hat{A}^2|a_i\rangle = a_i{}^2|a_i\rangle$ را می‌توان به‌صورت $\hat{A}^n|a_i\rangle = a_i{}^n|a_i\rangle$ تعمیم داد ، با استفاده از تعریف تابع عملگری غیر جبری ، داریم $\hat{F}(\hat{A})|a_i\rangle = F(a_i)|a_i\rangle$

حداقل یک مجموعه ویژه‌حالتهای مشترک هستند . در هرکدام از این حالتها $\hat{A}$ و $\hat{B}$ هردو می‌توانند با دقت کامل ، یعنی ، با عدم قطعیت صفر ، اندازه‌گیری شوند (اصل موضوع ۵) . از طرف دیگر ، اگر $\hat{A}$ و $\hat{B}$ جابه‌جاپذیر نباشند ، هیچ ویژه حالت مشترکی وجود ندارد (نتیجه قضیه ۴) . در نتیجه ، هیچ حالت فیزیکی‌ای که در آن A و B بتوانند به‌طورهمزمان با دقت‌کامل‌اندازه‌گیری‌شوند وجود ندارد .به‌این‌دلیل‌گفته‌می‌شود که عملگرهای جابه‌جاپذیر *سازگاراند* . بحث فوق به‌وسیله قضیه زیر به‌طور ریاضی فرمولبندی می‌شود .

قضیه ۷ (اصل عدم‌قطعیت‌هایزنبرگ) ــ *اگرسه‌مشاهده‌پذیرعملگری‌هرمیتی دررابطه‌جابه‌جائی*

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C} \qquad (۵۵-۳)$$

صدق کنند ، بدون توجه به‌حالت سیستم ، $|\beta\rangle$ ، نتایج اندازه‌گیریهای این مشاهده‌پذیرها باید با نامساوی هایزنبرگ ، یعنی

$$\Delta A_\beta \, \Delta B_\beta \geqslant \tfrac{1}{2}\langle C\rangle_\beta \qquad (۵۶-۳)$$

مطابقت داشته باشند .

اثبات ــ با استفاده از نامساوی شوارتز[4]

$$\langle\gamma|\gamma\rangle\langle\delta|\delta\rangle \geqslant |\langle\gamma|\delta\rangle|^2 \quad ، \quad |\delta\rangle \text{ و } |\gamma\rangle \text{ برای هر} \qquad (۵۷-۳)$$

شروع می‌کنیم . اثبات این نامساوی را می‌توان در اغلب متن‌های متعارف در مورد فضاهای برداری خطی پیدا کرد (رک مسئله ۳ــ۶) . در یک فضای سه‌بعدی حقیقی ، نامساوی شوارتز به‌صورت

$$a^2b^2 \geqslant (\mathbf{a}\cdot\mathbf{b})^2 = a^2b^2\cos^2\theta$$

در می‌آید . این نامساوی مطمئنا" در فضای حقیقی معتبر است زیرا $\cos^2\theta \leqslant 1$ برای اثبات این قضیه قرار می‌دهیم

$$|\gamma\rangle = (\hat{A} - \langle A\rangle_\beta)|\beta\rangle$$
$$|\delta\rangle = (\hat{B} - \langle B\rangle_\beta)|\beta\rangle$$

بنابراین

4- Schwarz

$$\langle\gamma|\gamma\rangle = \langle\beta|(\hat{A} - \langle A\rangle_\beta)(\hat{A} - \langle A\rangle_\beta)|\beta\rangle = \langle\beta|(\hat{A} - \langle A\rangle_\beta)^2|\beta\rangle = (\Delta A_\beta)^2$$

و

$$\langle\delta|\delta\rangle = \langle\beta|(\hat{B} - \langle B\rangle_\beta)(\hat{B} - \langle B\rangle_\beta)|\beta\rangle = \langle\beta|(\hat{B} - \langle B\rangle_\beta)^2|\beta\rangle = (\Delta B_\beta)^2$$

با استفاده از نامساوی شوارتز نتیجه می‌گیریم

$$\begin{aligned}(\Delta A_\beta)^2(\Delta B_\beta)^2 &= \langle\gamma|\gamma\rangle\langle\delta|\delta\rangle \\ &\geqslant |\langle\gamma|\delta\rangle|^2 = |\langle\beta|(\hat{A} - \langle A\rangle_\beta)(\hat{B} - \langle B\rangle_\beta)|\beta\rangle|^2\end{aligned} \qquad (۳-۵۸)$$

عملگر غیر هرمیتی $\hat{G} = (\hat{A} - \langle A\rangle_\beta)(\hat{B} - \langle B\rangle_\beta)$ را به‌صورت

$$\hat{G} = \hat{D} + \tfrac{1}{2}i\hat{C}$$

تجزیه می‌کنیم*، که در آن

$$\hat{D} = \frac{(\hat{A} - \langle A\rangle_\beta)(\hat{B} - \langle B\rangle_\beta) + (\hat{B} - \langle B\rangle_\beta)(\hat{A} - \langle A\rangle_\beta)}{2}$$

و

$$\hat{C} = \frac{(\hat{A} - \langle A\rangle_\beta)(\hat{B} - \langle B\rangle_\beta) - (\hat{B} - \langle B\rangle_\beta)(\hat{A} - \langle A\rangle_\beta)}{i} = \frac{[\hat{A}, \hat{B}]}{i}$$

عملگرهای $\hat{D}$ و $\hat{C}$ هردو هرمیتی‌اند. چون $\langle D\rangle_\beta$ و $\langle C\rangle_\beta$ هردوحقیقی‌اند، (۳-۵۸) به صورت

$$\begin{aligned}(\Delta A_\beta)^2(\Delta B_\beta)^2 \geqslant |\langle G\rangle_\beta|^2 &= |\langle D\rangle_\beta + \tfrac{1}{2}i\langle C\rangle_\beta|^2 \\ &= \langle D\rangle_\beta{}^2 + \tfrac{1}{4}\langle C\rangle_\beta{}^2 \geqslant \tfrac{1}{4}\langle C\rangle_\beta{}^2\end{aligned}$$

یا، بالاخره، به‌صورت

---

* حاصلضرب دوعملگر هرمیتی یک عملگر غیرهرمیتی است مگر اینکه دو عملگر جابه‌جاپذیر باشند

$$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = (\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger) = (\hat{B}\hat{A}) \neq (\hat{A}\hat{B})$$

$$\Delta A_\beta \, \Delta B_\beta \geqslant \tfrac{1}{2}\langle C\rangle_\beta \qquad (۵۹-۳)$$

در می‌آید .

اصل هایزنبرگ مقدار حاصل‌ضرب $\Delta A \, \Delta B$ در یک حالت‌را معلوم‌نمی‌کند ، بلکه حد پائینی این حاصل‌ضرب را برابر با $\frac{1}{2}\langle C\rangle$ به‌دست می‌دهد . اگر دو عملگر جابه‌جاپذیر باشند $(\hat{C}=0)$ ،حد پائینی حاصل‌ضرب عدم قطعیت‌های وابسته به‌اندازه‌گیریهای $\hat{A}$ و $\hat{B}$ صفر است . این نتیجه با بحث فوق سازگار است .

از روابط جابه‌جایی بنیادی

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \, \delta_{ij} \hat{1}$$

و

$$[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0$$

نتیجه می‌گیریم که $\Delta x_i \, \Delta x_j \geqslant 0, \Delta p_i \, \Delta p_j \geqslant 0$ و $\Delta x_i \, \Delta p_j \geqslant \frac{1}{2}\hbar \, \delta_{ij}$. بنابراین،به‌عنوان مثال ، عملگرهای $\hat{x}$ و $\hat{p}_x$ کاملا" ناسازگاراند و حالتی وجود ندارد که در آن حاصل‌ضربهای عدم قطعیت‌های آنها کمتراز $\frac{1}{2}\hbar$ باشد . این نکته ایجاب می‌کند که اگر تکانه یک ذره را دقیقا" بدانیم ، قادر نخواهیم بود با هیچ دقتی موضع آن را تعیین کنیم .

اگر سیستم دریک حالتی‌که به‌وسیله $|\beta\rangle$ مشخص شده‌است قرارداشته‌باشد ،ویژگیهای دینامیکی آن به‌طور احتمالاتی تعیین خواهند شد . فرض کنیم M سیستم اتمی یکسان‌داریم که همه در حالت $|\beta\rangle$ قرار دارند . هم‌چنین فرض کنیم آشکارسازی داریم که مشاهده‌پذیر $\hat{A}$ را اندازه‌گیری می‌کند . وقتی " A سنج " به‌اولین سیستم اعمال شود ، احتمال اینکه‌مقدار a_i را بخواند عبارت است از $|\langle a_i|\beta\rangle|^2$ ، اما ، وقتی اندازه‌گیری انجام شد و آشکار ساز a_i را ثبت کرد ، در این صورت بعداز اندازه‌گیری ، می‌دانیم که اولین سیستم اتمی‌دارای مقدار معین a_i است .در نتیجه ، تاثیر اندازه‌گیری ، بعداز اینکه ثبت a_i انجام شد ، عبارت است از وادارکردن سیستم به‌انتقال از حالت اولیه‌آن $|\beta\rangle$ به‌حالت جدید $|a_i\rangle$. به‌طور معادل ، تاثیر یک اندازه‌گیری واقعی $\hat{A}$ عبارت است از انتقال اجباری سیستم به‌یک ویژه حالت $\hat{A}$ که متناظر با مقدار خوانده شده است . بدین طریق ، یک دستگاه اندازه‌گیری مثل یک صافی عمل می‌کند و بردار حالت را روی ویژه حالت وابسته به‌مشاهده‌پذیر اندازه‌گیری شده تصویر می‌کند . ذهن دانشجو ممکن است با این واقعیت که وقتی اندازه‌گیری انجام می‌شود حالت سیستم به‌هم می‌خورد ، مغشوش شود .خوشبختانه این مسئله فقط‌آموزشی‌است

زیرا فرض کرده‌ایم که حالت اتمی تکرارپذیر است ، یعنی، $M-1$ سیستم اتمی‌دیگر داریم که درست مثل آن هستند . درحالی‌که حالت تعدادی از سیستم‌ها ممکن است در اثر اندازه‌گیری به‌هم خورده باشد ،اطلاعات به‌دست آمده به‌آن سیستم‌هائی که هنوز اندازه‌گیری نشده‌اند قابل اعمال است*.

۸ ــ دینامیک کوانتومی

جهت بردار حالت در هرلحظه طبیعت آماری سیستم فیزیکی را تعیین می‌کند . وقتی این بردار در فضای مختلط می‌چرخد ، مشخصه‌های فیزیکی سیستم با زمان تغییر می‌کنند . برای پیداکردن معادله حرکت بردار حالت ، که آنرا به‌صورت $|\beta, t\rangle$ می‌نویسیم ، نخست باید یک تناظر دینامیکی با مکانیک کلاسیکی برقرار کنیم .بنابراین ، خواهیم خواست که تناظری بین مقدارقابل انتظاریک مشاهده‌پذیر کوانتومی و تابع کلاسیکی متناظر باآن وجود داشته باشد ، یعنی ،

$$\langle\beta, t|\hat{A}|\beta, t\rangle = \langle A(t)\rangle_\beta \leftrightarrow A_{\text{class}}(t) \qquad (۶۰-۳)$$

به‌طور معادل ، انتظار داریم که معادله حرکت $\langle A(t)\rangle_\beta$ ، که در اثر چرخش $|\beta, t\rangle$ ایجاد شده‌است ،شبیه به‌معادله حرکت تابع کلاسیکی $A_{\text{class}}(t)$ باشد .این شرط به‌قضیه‌اهرنفست موسوم است . بنابراین ،با قیاس با شکل کلاسیکی معادله حرکت (۲ــ۷۶) ،معادله‌حرکت‌برای مقدار قابل انتظار یک عملگر را به‌صورت زیر وضع می‌کنیم

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle A(t)\rangle_\beta &= \frac{d}{dt}\langle\beta, t|\hat{A}|\beta, t\rangle \\ &= \langle\beta, t|\frac{[\hat{A},\hat{\mathscr{H}}]}{i\hbar}|\beta, t\rangle + \langle\beta, t|\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}|\beta, t\rangle\end{aligned} \qquad (۶۱-۳)$$

---

* برای یک بررسی مقدماتی بسیار جالب از فرایند اندازه‌گیری به‌کتاب زیر مراجعه کنید .

R.P. Feynman,R.B. Leighton and M.Sands,"The Feynman Lectures on physics",Vol.3, Chapters 1 and 2. Addison-Wesley,Reading, Massachusetts,1964.

بستگی زمانی $\langle A(t)\rangle_\beta$ از بستگی ضمنی، یعنی، تغییرات $|\beta, t\rangle$ و هم چنین احیاناً از بستگی صریح در خود عملگر، نشأت می‌گیرد. ما فقط درموارد نادری عملگرهایی با بستگی صریح به‌زمان در نظر خواهیم گرفت. برای تضمین (۳-۶۱)، اصل موضوع زیر را ارائه می‌دهیم.

اصل موضوع ۶- حرکت بردار حالت یک سیستم فیزیکی به‌وسیله معادله حرکت شرودینگر که، در شکل کت، عبارت است از

$$\mathscr{H}\,|\beta, t\rangle = i\hbar \frac{d}{dt}|\beta, t\rangle \qquad (۶۲-۳)$$

یا، در شکل برا، عبارت است از

$$\langle\beta, t|\,\mathscr{H} = -i\hbar \frac{d}{dt}\langle\beta, t| \qquad (\mathscr{H} = \mathscr{H}^\dagger)$$

تعیین می‌شود که در آن $\mathscr{H}$ عملگرهامیلتونی سیستم است.

برای تحقیق اینکه معادله حرکت شرودینگر واقعاً به (۳-۶۱) منجر می‌شود، مشتق گرفته و نتیجه می‌گیریم

$$\frac{d}{dt}\langle\beta, t|\hat{A}|\beta, t\rangle = \langle\beta, t|\hat{A}|\left\{\frac{d}{dt}|\beta, t\rangle\right\} + \left\{\frac{d}{dt}\langle\beta, t|\right\}\hat{A}|\beta, t\rangle + \langle\beta, t|\frac{\partial A}{\partial t}|\beta, t\rangle$$

جمله آخری از بستگی صریح عملگر $\hat{A}$ به‌زمان سرچشمه می‌گیرد. با به‌کارگرفتن شکلهای کت و برای معادله شرودینگر، خواهیم داشت

$$\frac{d}{dt}\langle\beta, t|\hat{A}|\beta, t\rangle = \langle\beta, t|\hat{A}\left\{\frac{1}{i\hbar}\mathscr{H}|\beta, t\rangle\right\}$$
$$+\left\{-\frac{1}{i\hbar}\langle\beta, t|\mathscr{H}\right\}\hat{A}|\beta, t\rangle + \langle\beta, t|\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}|\beta, t\rangle$$

یا

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle_\beta = \left\langle\frac{[\hat{A},\mathscr{H}]}{i\hbar}\right\rangle_\beta + \left\langle\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right\rangle_\beta \qquad (۶۳-۳)$$

که همان چیزی است که می‌خواستیم.

باید تاکید شود که "تصویر" شرودینگر که در آن بردار حالت می‌چرخد (تحول می‌یابد. م) تنها یکی از چندطریقی است که با آنها (۳-۶۳) حاصل می‌شود. هم چنین ممکن است تصویری

داشته باشیم‌که درآن بردار حالت مانا بماند و اجازه دهد که ویژه بردارهای $\hat{A}$ (هم‌چنین خود $\hat{A}$) طوری تغییرکنند که مقادیر قابل‌انتظار مطابق با (۳ـ۶۳) تغییر کنند . این‌نمایش حرکت کوانتومی به‌تصویرهایزنبرگ مشهور است . در یک تصویر سوم ، تصویر برهمکنشی، هم بردارهای حالت وهم ویژه بردارهای $\hat{A}$ به‌طریقی حرکت می‌کنند که (۳ـ۶۳) را محفوظ نگاه می‌دارند (به‌پیوست ب مراجعه کنید) . ما کلا" در " تصویر شرودینگر " کار خواهیم کرد .

به‌عنوان یک نتیجه از (۳ـ۶۳) توجه کنیم‌که اگر یک عملگر $\hat{A}$ به‌طور صریح به زمان بستگی نداشته باشد (یعنی ، $\partial\hat{A}/\partial t = 0$) مقدار قابل انتظار آن در صورتی ثابت خواهد بود که با هامیلتونی جابه‌جاپذیر باشد ، یعنی ، داشته باشیم $[\hat{A}, \mathscr{H}] = 0$

جواب معادله شرودینگر (۳ـ۶۲) می‌تواند به‌طور صریح به‌صورت

$$|\beta, t\rangle = \left[\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mathscr{H}(t-t_0)\right)\right]|\beta, t_0\rangle \qquad (۶۴-۳)$$

نوشته شود به‌شرط این که $\mathscr{H}$ مستقل از زمان باشد . کت $|\beta, t_0\rangle$ بیانگرحالت‌اولیه‌سیستم در $t = t_0$ است . برای تحقیق این جواب ، از هردو طرف نسبت به‌زمان مشتق می‌گیریم و خواهیم داشت

$$\frac{d}{dt}|\beta, t\rangle = \left[-\frac{i}{\hbar}\mathscr{H}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mathscr{H}(t-t_0)\right)\right]|\beta, t_0\rangle$$

با استفاده از (۳ـ۶۴) ، معادله فوق خواهد شد

$$\frac{d}{dt}|\beta, t\rangle = -\frac{i}{\hbar}\mathscr{H}|\beta, t\rangle$$

که همان معادله حرکت خواسته شده است .

تحول‌زمانی در (۳ـ۶۴) را می‌توان به‌صورت زیر نوشت

$$|\beta, t\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\beta, t_0\rangle$$

که در آن عملگر تحول عبارت است از

$$\hat{U}(t, t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mathscr{H}(t-t_0)\right) \qquad (۶۵-۳)$$

در موردی که $\mathscr{H}$ به‌زمان بستگی داشته باشد عملگرتحول نمی‌تواند به‌صورت (۳ـ۶۵) نوشته شود . می‌توان نشان داد که عملگر تحول در معادله انتگرالی زیر صدق می‌کند

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{1} + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} \mathscr{H}(\tau_1)\hat{U}(\tau_1, t_0)\, d\tau_1 \qquad (۶۶-۳)$$

می‌توان مستقیما" ثابت کرد که وقتی $\mathscr{H}$ مستقل از زمان باشد ، (۳ـ۶۵) در (۳ـ۶۶) صدق می‌کند .

اصول موضوع وقضایای فوق‌را با یک مثال ساده ولی‌فرضی مصورمی‌کنیم . دو مشاهده‌ـ پذیروابسته به‌یک ذره را به‌ترتیب عملگر $\hat{S}$ و عملگر $\hat{I}$ در نظر بگیریم . فرض‌کنیم که‌مقادیر مشخصه $\hat{S}$ عبارت باشند از s_1 و s_2 . هم‌چنین فرض‌کنیم دوحالت مشخصه $\hat{I}$ عبارت‌باشند از I_1 و I_2 . سپس فرض کنیم که این عملگرها در ویژه پایه $\hat{S}$ شکلهای زیر را به‌خودبگیرند

$$\hat{S} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad \text{و} \qquad \hat{I} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

چون در ویژه پایه $\hat{S}$ کار می‌کنیم ($\hat{S}$ قطری است) ، ویژه‌بردارها و ویـــژه مقدارهـــای آن عبارت‌اند از

$$|s_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad ، \quad s_1 = 0 \qquad \text{برای}$$

و

$$|s_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad ، \quad s_2 = 1 \qquad \text{برای}$$

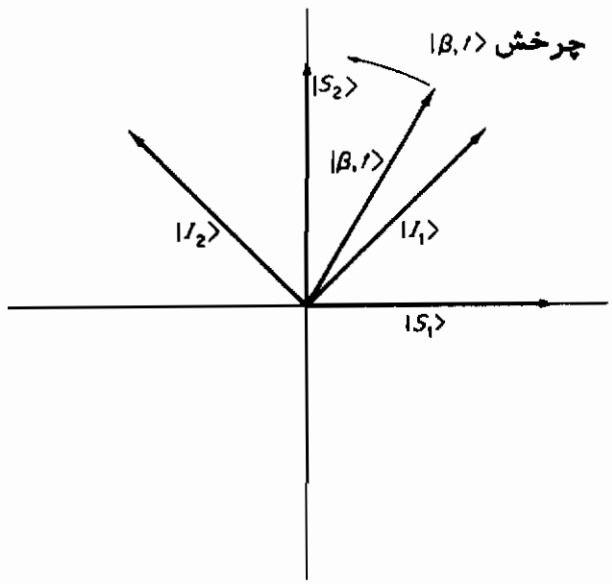
ویژه‌بردارهای $\hat{I}$ می‌توانند مستقیما" به‌صورت زیر به‌دست آیند

$$|I_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad ، \quad I_1 = 0 \qquad \text{برای}$$

و

$$|I_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad ، \quad I_1 = 1 \qquad \text{برای}$$

توجه‌کنیم‌که ویژه پایه‌های این دوعملگر هرمیتی نا تبهگن متمایزاند (شکل۳ـ۲) . این‌مطلب می‌تواند ازاین واقعیت‌که ماتریسهای وابسته به $\hat{S}$ و $\hat{I}$ جابه‌جاپذیر نیستند پیش‌بینی‌شود . در نتیجه ، این دو عملگر ناسازگاراند و حالتی وجود ندارد که درآن هردو به‌طور همزمان با دقت کامل تعیین شوند .



شکل (۳ـ۲)

فرض کنیم که در یک لحظه بردار حالت $|\beta, t\rangle$ به‌وسیله

$$|\beta, t\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2}\sqrt{3} \end{pmatrix}$$

داده شده باشد . احتمالهای مشاهده سیستم در حالتهای مختلف عبارتنداز

$$\mathscr{P}_\beta(s_1) = |\langle s_1|\beta, t\rangle|^2 = \left[(1, 0)\begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2}\sqrt{3} \end{pmatrix}\right]^2 = (\tfrac{1}{2})^2 = \tfrac{1}{4}$$

$$\mathscr{P}_\beta(s_2) = |\langle s_2|\beta, t\rangle|^2 = \left[(0, 1)\begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2}\sqrt{3} \end{pmatrix}\right]^2 = (\tfrac{1}{2}\sqrt{3})^2 = \tfrac{3}{4}$$

$$\mathscr{P}(I_1) = |\langle I_1|\beta, t\rangle|^2 = \left[\left(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}\right)\begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2}\sqrt{3} \end{pmatrix}\right]^2 = \tfrac{1}{8}(1 + \sqrt{3})^2$$

$$= \tfrac{1}{8}(4 + 2\sqrt{3}) = \tfrac{1}{2} + \tfrac{1}{4}\sqrt{3} = 0.933$$

$$\mathscr{P}(I_2) = |\langle I_2|\beta, t\rangle|^2 = \left[\left(-\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}\right)\begin{pmatrix}\frac{1}{2}\\ \frac{1}{2}\sqrt{3}\end{pmatrix}\right]^2 = \tfrac{1}{8}(-1+\sqrt{3})^2$$
$$= \tfrac{1}{8}(4-2\sqrt{3}) = \tfrac{1}{2} - \tfrac{1}{4}\sqrt{3} = 0.067.$$

مقادیر قابل انتظار هرکدام از مشاهده‌پذیرها در این حالت عبارتنداز

$$\langle\beta, t|\hat{S}|\beta, t\rangle = (\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}\sqrt{3})\begin{pmatrix}0 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{1}{2}\\ \frac{1}{2}\sqrt{3}\end{pmatrix} = \tfrac{3}{4}$$

و

$$\langle\beta, t|\hat{I}|\beta, t\rangle = (\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}\sqrt{3})\begin{pmatrix}\frac{1}{2} & -\frac{1}{2}\\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{1}{2}\\ \frac{1}{2}\sqrt{3}\end{pmatrix} = 0.067$$

این مقادیر قابل انتظار می‌توانند به‌عنوان نمایش‌دهنده مقادیر متوسط $\hat{S}$ و $\hat{I}$ تعبیر شوند.

به‌تدریج که بردار حالت با زمان متحول می‌شود (می‌چرخد) ، احتمالات و مقادیرقابل انتظار وابسته به $\hat{S}$ و $\hat{I}$ تغییر می‌کنند و اثرات حرکت کوانتومی را به‌دست می‌دهند . اگر $\hat{S}$ و $\hat{I}$ حقیقتا" متغیرهای بندادی بودند ، می‌توانستیم هامیلتونی وعملگرهای تحول سیستم را بسازیم و تحول حالت را پیشگوئی کنیم .

۹ ــ حالتهای مانا

اگر در $t = t_0 = 0$ سیستم به‌وسیله یک بردار حالت $|\beta, t_0\rangle = |\beta, 0\rangle$ مشخص شده باشد تحول بعدی آن با استفاده از عمل

$$|\beta, t\rangle = \hat{U}(t, 0)|\beta, 0\rangle \qquad (۶۷-۳)$$

به‌دست می‌آید که در آن $\hat{U}$ به‌وسیله رابطه

$$U(t, 0) = e^{-i\mathscr{H}t/\hbar}$$

به‌هامیلتونی سیستم مرتبط می‌شود .فرض کنیم حالت اولیه در واقع یک ویژه حالت‌هامیلتونی که آنرا با $|\beta, 0\rangle = |\varepsilon_i\rangle$ نمایش می‌دهیم ، بوده باشد . در چنین حالتی انرژی‌دقیقا" برابر با ویژه‌مقدارمتناظر ε_i خواهد بود .با استفاده از (۳ــ۶۷) حالت را در زمانهای‌بعدبه‌صورت

$$|\beta, t\rangle = e^{-i\mathscr{H}t/\hbar}|\varepsilon_i\rangle$$

پیدا می‌کنیم . اما اگر $|\varepsilon_i\rangle$ یک ویژه‌بردار $\mathscr{H}$ با ویژه مقدار ε_i باشد ، باید ویژه بردار $e^{-i\mathscr{H}t/\hbar}$ با ویژه مقدار $e^{-i\varepsilon_i t/\hbar}$ نیز باشد . تحول حالت خواهد شد

$$|\beta, t\rangle = e^{-i\omega_i t}|\varepsilon_i\rangle \qquad (\omega_i = \varepsilon_i/\hbar)$$

ضریب نوسانی یک کمیت نرده‌ای مختلط با قدر مطلق یک است و تاثیری روی جهت بردار حالت اولیه ندارد . هم‌چنین توجه کنیم که

$$\begin{aligned}\langle\beta, t|\beta, t\rangle &= \langle\varepsilon_i|e^{i\varepsilon_i t/\hbar}e^{-i\varepsilon_i t/\hbar}|\varepsilon_i\rangle \\ &= \langle\varepsilon_i|\varepsilon_i\rangle = 1\end{aligned}$$

بنابراین هنجار حالت نیز برابر با یک باقی می‌ماند . حالت $|\beta, t\rangle$ از نظر فیزیکی معادل با $|\varepsilon_i\rangle$ است و ابدا" تحولی‌صورت نمی‌گیرد .در نتیجه به‌قاعده زیر هدایت‌خواهیم‌شد.

قاعده: اگر سیستمی در آغاز در یک ویژه حالت هامیلتونی (انرژی) باشد ، تا ابد در این حالت باقی‌خواهد ماند و تمام مقادیر قابل انتظار مشاهده‌پذیرها مانا خواهندبود.

این قاعده توضیح می‌دهد چرا الکترون هیدرژنی در یکی از مدارهای بوهر تا ابد مانا می‌ماند مگر اینکه یک عامل خارجی (به‌عنوان مثال ، یک میدان الکترومغناطیسی) روی آن اثر کند . براهمیت هامیلتونی و ویژه‌حالتهای انرژی‌آن هرچه‌تاکید کنیم‌کم‌است .هامیلتونی تحول تمام حالتها را تعیین می‌کند و به‌عنوان مولد جابه‌جایی در زمان نامیده می‌شود . ویژه‌حالتهای آن ضمن اینکه حالتهای انرژی مشخصه‌اند مانا نیز هستند .

۱۰ــ ابعاد "فضای کوانتومی"

قضایا و اصول موضوع فوق بدون اشاره به N ، تعداد ابعاد فضا ، برقرار شدند.اکنون سه دلیل ارائه می‌کنیم که پیشنهاد می‌کنند تعداد این ابعاد باید بینهایت باشد .

نخست ، رابطه جابه‌جایی‌بنیادی

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar\hat{1} \qquad (۶۸-۳)$$

را در نظر بگیریم . به‌سادگی می‌توان ثابت کرد که در یک فضای محدود بعدی ، رد حاصل‌ضرب هردو عملگری مستقل از ترتیب ضرب آنهاست . لذا نتیجه می‌شود که برای

هردو عملگری باید داشته باشیم

$$\mathrm{Tr}\,\hat{A}\hat{B} - \mathrm{Tr}\,\hat{B}\hat{A} = \mathrm{Tr}(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) = \mathrm{Tr}[\hat{A}, \hat{B}] = 0$$

اما رد عملگر همانی $\hat{1}$ لزوما" عبارت است از

$$\mathrm{Tr}\,\hat{1} = N \neq 0$$

باگرفتن رد دوطرف (۳ـ۶۸) به‌یک ناسازگاری خواهیم رسید که فقط در یک فضای بینهایت بعدی حل خواهد شد*.

ثانیا"، تعداد مقادیر مشخصه یک‌مشاهده‌پذیر باید با تعداد ویژه مقدارهای متمایز، که به‌نوبه خود نمی‌تواند بیشتر از تعداد ابعاد فضائی باشد که عملگر در آن‌نمایش داده می‌شود، برابر باشد. اما تعداد مقادیر مشاهده‌شده یک مشاهده‌پذیر کلاسیکی عموما" بینهایت است. به‌عنوان مثال، انرژیهای مشخصه‌ای که توسط پلانک برای نوسانگر یک‌بعدی حدس زده شد عبارتنداز

$$\varepsilon_n = nh\nu$$

که در آن n عدد صحیحی است که از صفر تا بینهایت را می‌تواند اختیار کند. بنابراین، نمایش هامیلتونی نوسانگر، یک فضای بینهایت بعدی را طلب میکند.

هنوز یک دلیل سوم، و شاید مهمتری، برای لزوم یک فضای بینهایت بعدی وجود دارد. حالتهای مشخصه مکان را که با معادله

$$\hat{\mathbf{r}}|\mathbf{r}_i\rangle = \mathbf{r}_i|\mathbf{r}_i\rangle \qquad (۳-۶۹)$$

تعیین می‌شوند در نظر بگیریم. هر کت $|\mathbf{r}_i\rangle$ حالتی را نمایش می‌دهدکه در آن‌ذره به‌طور مشخص در نقطه $\mathbf{r}_i$، یعنی، (x_i, y_i, z_i)، در فضا قراردارد. وقتی‌سیستم در یکی‌ازاین‌ویژه حالتها باشد عدم قطعیت ناظر برمکان صفر است. از اصل عدم قطعیت نتیجه می‌شود که مشخصه‌های تکانه‌ای در این حالتها کاملا" نامعین هستند. لیکن، مشخصه‌بودن تمام نقاط درفضا، یعنی اینکه اندازه‌گیری دقیق مکان ذره در هرجا امکان‌پذیراست‌یک‌واقعیت‌عینی‌است

---

* فضای بینهایت بعدی با ویژگیهائی که در بالا توصیف شد از نظر ریاضی به فضای برداری هیلبرت[5] موسوم است.

5- Hilbert

به‌بیان دیگر، مکان کوانتیده نیست. معنی این مطلب این نیست که (۳ـ۶۹) معتبر نیست بلکه این است که طیف $\hat{\mathbf{r}}$ به‌جای گسسته‌بودن (شمارش‌پذیربودن) پیوسته است*. برای نشان‌دادن پیوستگی طیف در (۳ـ۶۹) شاخص را حذف کرده و می‌نویسیم

$$\hat{\mathbf{r}}|\mathbf{r}\rangle = \mathbf{r}|\mathbf{r}\rangle \qquad (۳-۷۰)$$

چون $\hat{\mathbf{r}}$ و $\hat{\mathbf{p}}$ به‌طور متقارن در روابط جابه‌جایی بنیادی ظاهر می‌شوند، پیوستگی طیف تکانه خطی تعجب‌آور نخواهد بود و می‌توان نوشت

$$\hat{\mathbf{p}}|\mathbf{p}\rangle = \mathbf{p}|\mathbf{p}\rangle \qquad (۳-۷۱)$$

در هر ویژه حالت $\hat{\mathbf{p}}$، ذره دقیقا" با سرعت $\mathbf{v} = \mathbf{p}/m$ حرکت می‌کند، اما، البته، مکان‌آن مبهم‌است. *یک فضای محدود بعدی نمی‌تواند برای نمایش عملگرهائی‌که دارای طیف پیوسته هستند به‌کار رود.*

دانشجو در این مرحله باید قادر باشد بردارهای گسسته در یک فضای بینهایت‌بعدی را، با میل دادن N به‌سمت بینهایت، $N \to \infty$، از نظر مفهوم تصور کند. در یک ویژه پایه گسسته عملگرها به‌صورت ماتریسهایی با بینهایت ستون و بینهایت سطر در می‌آیند. بردارهای‌کت به‌صورت ماتریس ستونی بینهایت درمی‌آیند، یعنی، دارای بینهایت‌مولفه‌اند. ولی، نمایش یک بردار یا یک عملگر در یک ویژه پایه پیوسته نمی‌تواند مثل یک ماتریس عادی ارائه شود. بنابراین باید به‌یک چارچوب ریاضیاتی مطلق تکیه کنیم.

راست‌هنجاربودن دو ویژه بردار پیوسته عملگر $\hat{\mathbf{r}}$ به‌صورت

$$\langle \mathbf{r}_i|\mathbf{r}_j\rangle = \delta_{ij} \to \langle \mathbf{r}'|\mathbf{r}\rangle = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \qquad (۳-۷۲)$$

نوشته خواهد شد. *تابع دلتای دیراک* (۳ـ۷۲) تعمیم مستقیمی از دلتای کرونکر می‌باشد و دارای ویژگیهای زیر است

(الف) برای $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$ ، $\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = \infty$

(ب) برای $\mathbf{r} \neq \mathbf{r}'$ ، $\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = 0$

(ج) سطح زیرمنحنی $= \int \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\, d\mathbf{r}' = 1$

---

* ویژه‌بردارهای متعلق به‌طیف پیوسته دارای هنجارمحدود نمی‌باشند و لذا به‌معنی متداول قابل بهنجار کردن نیستند. به‌طور دقیقتر، این بردارها جزئی از یک فضای هیلبرت نیستند.

$$\int f(\mathbf{r}')\,\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\,d\mathbf{r}' = f(\mathbf{r}) \qquad (\text{د})$$

ناحیه انتگرال‌گیری تمام‌فضا را می‌پوشاند. ویژگی آخر به‌نام ویژگی "غربالی" نامیده می‌شود و بارها مورد استفاده قرار خواهد گرفت. به‌عنوان تمرینی که تابع دلتا را در برداشته‌باشد، به‌مسئله (۳–۱۰) مراجعه کنید.

۱۱– نمایش مختصه‌ای*

بسط یک بردار در ویژه پایه پیوسته $\mathbf{r}$ با به‌کارگرفتن

$$|\beta, t\rangle = \sum_i \langle \mathbf{r}_i|\beta, t\rangle|\mathbf{r}_i\rangle \to \int d\mathbf{r}(\langle \mathbf{r}|\beta, t\rangle)|\mathbf{r}\rangle \qquad (۳-۷۳)$$

انجام می‌گیرد. این یک تعمیم مستقیم (۳–۴۵) است‌که درآن به‌جای جمع انتگرال‌جایگزین شده است. چون ویژه مقدار $\mathbf{r}$ متغیر پیوسته‌ای است، ضریب موجود در (۳–۷۳)، یعنی،

$$\Psi_\beta(\mathbf{r}, t) = \langle \mathbf{r}|\beta, t\rangle$$

می‌تواند به‌عنوان یک تابع پیوسته در نظر گرفته شود. با تعمیم‌اصل موضوع ۴، کمیت

$$|\langle \mathbf{r}|\beta, t\rangle|^2\, d\mathbf{r} = |\Psi_\beta|^2\, d\mathbf{r} \qquad (۳-۷۴)$$

احتمال این را که سیستم در یک حجم دیفرانسیلی $d\mathbf{r}$ فضا حول نقطه $\mathbf{r}$ یافت شود، بیان می‌کند. کمیت $\mathscr{P}_\beta = |\Psi_\beta|^2$ عبارت است از *چگالی احتمال* یافتن ذره در نقطه $\mathbf{r}$ و در زمان t، وقتی که سیستم به‌وسیله $|\beta, t\rangle$ مشخص شده باشد. همان‌طور که در زیر خواهیم دید $\Psi_\beta(\mathbf{r}, t)$ *تابع حالت* سیستم نامیده‌می‌شود و حاوی تمام اطلاعات دینامیکی مربوط به‌سیستم در ویژه پایه $\mathbf{r}$ است.

رابطه کامل‌بودن برای ویژه بردارهای $\mathbf{r}$ به‌صورت

$$\sum_i |\mathbf{r}_i\rangle\langle \mathbf{r}_i| = \hat{1} \to \int d\mathbf{r}|\mathbf{r}\rangle\langle \mathbf{r}| = \hat{1} \qquad (۳-۷۵)$$

---

* در *نمایش تکانه‌ای*، بردارها در ویژه پایه پیوسته عملگر $\mathbf{p}$ بسط داده می‌شوند. به‌مسئله ۱–۵ مراجعه کنید.

نوشته می‌شود . همیشه فرض خواهیم کرد که $\mathcal{F}$ ناتبهگن است و در نتیجه ویژه پایه $\mathcal{F}$ راست هنجار و یکتا است*.

کار با ویژه پایه پیوسته عملگر $\mathcal{F}$ (نمایش مختصه‌ای) دارای یک مزیت برجسته است . در یک پایه گسسته $|a_i\rangle$ ، یک بردار حالت دلخواه $|\beta, t\rangle$ بوسیله یک مجموعه بینهایت از مولفه‌ها ، یعنی

$$\beta^{(a_i)} = \langle a_i|\beta, t\rangle$$

مشخص می‌شود . از طرف دیگر ، در نمایش مختصه‌ای یک بردار حالت تنها بوسیله یک تابع حالت پیوسته

$$\Psi_\beta(\mathbf{r}, t) = \langle \mathbf{r}|\beta, t\rangle$$

بطور کامل مشخص می‌شود . در مطالعه یک ذره ، نمایش مختصه‌ای محتملا" خیلی مفیدتر است . مع ذالک ، باید تاکید شود که این نمایش فقط وقتی امکان‌پذیر است که $\mathcal{F}$ یک مشاهده‌پذیر باشد .

در نمایش مختصه‌ای ، هر بردار می‌تواند بصورت

$$|\beta\rangle = \int \Psi_\beta(\mathbf{r})|\mathbf{r}\rangle\, d\mathbf{r} \qquad (۳-۷۶ \text{ الف})$$

یا ، بشکل برا ، بصورت

$$\langle\beta| = \int \Psi_\beta^*(\mathbf{r})\langle\mathbf{r}|\, d\mathbf{r} \qquad (۳-۷۶ \text{ ب})$$

نمایش داده شود . حاصلضرب داخلی دوبردار در نمایش مختصه‌ای خواهد شد

$$\begin{aligned}\langle\alpha|\beta\rangle &= \left\{\int \langle\mathbf{r}'|\Psi_\alpha^*(\mathbf{r}')\, d\mathbf{r}'\right\}\left\{\int \Psi_\beta(\mathbf{r})|\mathbf{r}\rangle\, d\mathbf{r}\right\} \\ &= \iint d\mathbf{r}\, d\mathbf{r}' \Psi_\alpha^*(\mathbf{r}')\Psi_\beta(\mathbf{r})\langle\mathbf{r}'|\mathbf{r}\rangle\end{aligned}$$

با استفاده از راست هنجاربودن ویژه پایه $\mathcal{F}$ (یعنی $\langle\mathbf{r}'|\mathbf{r}\rangle = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$) و ویژگی غربالی

---

* کامل‌بودن ویژه‌پایه $\mathcal{F}$ هم‌چنین برای بسط حالتهای دلخواهی‌که شامل خصوصیات‌فضائی ذره هستند ، در نظر گرفته می‌شود .

تابع دلتا ، خواهیم داشت

$$\langle\alpha|\beta\rangle = \int \Psi^*_\alpha(\mathbf{r})\Psi_\beta(\mathbf{r})\, d\mathbf{r} \qquad (۷۷-۳)$$

قاعده ــ حاصل‌ضرب داخلی دوبردار حالت می‌تواند باانتگرال‌گیری از حاصل‌ضرب تابع حالتهای آنها در نمایش مختصه‌ای محاسبه شود .

تابع وابسته به‌یک ویژه‌بردار $|a_i\rangle$ از یک عملگر $\hat{A}$ ، ویژه تابع $\hat{A}$ نامیده می‌شود و به‌صورت

$$\psi_{a_i}(\mathbf{r}) = \langle\mathbf{r}|a_i\rangle \qquad (۷۸-۳)$$

نوشته می‌شود . این ویژه تابع یک ویژه حالت $\hat{A}$ را مشخص می‌کند . بنابراین ، به‌جای پیدا کردن ویژه بردارهای مشاهده‌پذیرها ،کافی است ویژه تابعهای وابسته به‌حالتهای مشخصه متناظر را پیدا کنیم .

پیداکردن ویژه تابعهای یک عملگر ساده‌تر از پیداکردن ویژه‌بردارهای مجرد آن است زیرا در حالی که ویژه‌بردارها در یک معادله ویژه مقداری برداری بینهایت بعدی صدق می‌کنند ،ویژه تابعها ، همان‌طور که نشان خواهیم‌داد ، در یک معادله دیفرانسیل صدق می‌کنند . نمایش مکانیک کوانتومی در ویژه پایه $\hat{\mathbf{r}}$ مکانیک موجی نیز نامیده می‌شود و نخستین‌بار توسط شرودینگر توسعه داده شد . بعدا" فرمولبندی ریاضی نظریه کوانتومی را به‌زبان دیفرانسیلی مکانیک موجی بسط می‌دهیم . تمام کمیتهای فیزیکی ، یعنی ،حاصل ــ ضربهای داخلی ، احتمالات ، مقادیر قابل‌انتظار ، عدم قطعیت‌ها و غیره ، بدون توجه‌به‌نوع نمایش ، دست‌نخورده می‌مانند . هروقت ممکن باشد روی مکانیک موجی تکیه خواهیم کرد . در مسائلی که $\hat{\mathbf{r}}$ مشاهده‌پذیر بندادی نیست ، به‌عنوان مثال ،در نمایش‌دادن اسپین ذاتی و درکوانتش میدان الکترومغناطیسی ،باید به‌جای مکانیک موجی شرودینگر فرمولبندی عمومی‌تر دیراک را به‌کار ببریم .

۱۲ــ گذار به‌مکانیک موجی

بحث حاضر را به‌یک ذره منفرد که مشاهده‌پذیرهای مربوط به‌آن توابعی از $\hat{\mathbf{p}}$ و $\hat{\mathbf{r}}$ هستند محدودمی‌کنیم .می‌خواهیم ویژه‌مقدارها و ویژه‌تابعهای یک تابع عملگری $\hat{A}(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{r}})$ را پیدا کنیم . معادله ویژه مقداری برداری عبارت است از

$$\hat{A}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle \qquad (۳-۷۹)$$

با ضرب داخلی $\langle \mathbf{r}|$ در دوطرف این معادله، معادله نرده‌ای

$$\langle \mathbf{r}|\hat{A}|a_i\rangle = a_i\langle \mathbf{r}|a_i\rangle = a_i\psi_{a_i}(\mathbf{r}) \qquad (۳-۸۰)$$

را به‌دست خواهیم آورد. با این که طرف راست شامل ویژه تابع است، هنوز روشن نیست طرف چپ چه چیزی را بیان می‌کند. برای تعیین عناصر ماتریسی $\langle \mathbf{r}|\hat{A}|a_i\rangle$ فرض می‌کنیم که عملگر به‌شکل

$$\hat{A}(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{r}}) = \hat{G}(\hat{\mathbf{p}}) + \hat{K}(\hat{\mathbf{r}}) \qquad (۳-۸۱)$$

باشد (به‌عنوان مثال، $\hat{A}$ می‌تواند عملگر هامیلتونی $\mathscr{H}$ باشدکه شامل یک جمله انرژی‌جنبشی ویک جملهٔ انرژی پتانسیل است). گرچه این شکل تا اندازه‌ای حالت خاص است، ولی نتایج کاملا" عمومی باقی می‌مانند. با بردن (۳-۸۱) در (۳-۸۰)، نتیجه خواهیم گرفت

$$\langle \mathbf{r}|\hat{G}(\hat{\mathbf{p}})|a_i\rangle + \langle \mathbf{r}|\hat{K}(\hat{\mathbf{r}})|a_i\rangle = a_i\psi_{a_i}(\mathbf{r}) \qquad (۳-۸۲)$$

محاسبه جمله دوم طرف چپ ساده است. چون $\langle \mathbf{r}|$ یک ویژه برای $\hat{\mathbf{r}}$ است باید ویژه برای $\hat{K}(\hat{\mathbf{r}})$، با ویژگی

$$\langle \mathbf{r}|\hat{K}(\mathbf{r}) = K(\mathbf{r})\langle \mathbf{r}|$$

نیز باشد. معادله (۳-۸۲) خواهد شد

$$\langle \mathbf{r}|\hat{G}(\hat{\mathbf{p}})|a_i\rangle + K(\mathbf{r})\psi_{a_i}(\mathbf{r}) = a_i\psi_{a_i}(\mathbf{r}) \qquad (۳-۸۳)$$

برای کامل‌کردن این تحلیل باید عنصر ماتریس $\langle \mathbf{r}|\hat{G}(\hat{\mathbf{p}})|a_i\rangle$ را تعیین‌کنیم، و این کار وقتی انجام‌پذیر است که تاثیر $\hat{\mathbf{p}}$ روی یک ویژه‌بردار $\langle \mathbf{r}|$ معلوم باشد. برای انجام این کار به‌قضیه زیر نیازمندیم.

قضیه ۸ــ عملگر $\hat{p}_x$ مولد *انتقالهای بینهایت کوچک در امتداد محور x است*. به‌زبان‌ریاضی داریم**

---

* به‌فصل ۲ معادله (۲-۸۱) مراجعه کنید عملگر داخل پرانتز در واقع دوجمله اول بسط تیلور

$$\hat{U}_{p_x}(x) = \exp(-i\hat{p}_x x/\hbar)$$

که یک انتقال محدود x در امتداد محور x ها ایجاد می‌کند، می‌باشد.

$$\left\{\hat{1} + \frac{\hat{p}_x\, dx}{i\hbar}\right\}|x, y, z\rangle = |x + dx, y, z\rangle \qquad (۸۴-۳)$$

یعنی ، تاثیر عملگر داخل پرانتز روی یک بردار حالت ، $|\mathbf{r}\rangle = |x, y, z\rangle$ ، عبارت است از انتقال ذره به‌اندازه dx در امتداد محور x .

اثبات ــ می‌خواهیم ثابت کنیم که جمله طرف چپ (۳ــ۸۴) در واقع یک ویژه بردار $\hat{x}$ وابسته به ویژه مقدار $x + dx$ است ، یعنی ،

$$\hat{x}\left[\left\{\hat{1} + \frac{\hat{p}_x\, dx}{i\hbar}\right\}|x, y, z\rangle\right] = (x + dx)\left[\left\{\hat{1} + \frac{\hat{p}_x\, dx}{i\hbar}\right\}|x, y, z\rangle\right] \quad (۸۵-۳)$$

طرف چپ ، با استفاده از رابطه جابه‌جایی $\hat{x}\hat{p}_x = i\hbar\hat{1} + \hat{p}_x\hat{x}$ ، می‌تواند به‌صورت

$$\left\{\hat{x} + dx\,\hat{1} + \frac{\hat{p}_x\hat{x}\, dx}{i\hbar}\right\}|x, y, z\rangle = \left\{x + dx + \frac{x\, dx\, \hat{p}_x}{i\hbar}\right\}|x, y, z\rangle$$

نوشته شود . اما ، این دقیقا" برابر با طرف راست (۳ــ۸۵) است . این مطلب پس از انجام ضرب و حذف جمله‌های از مرتبه dx^2 ، یعنی ،

$$\left\{x + \frac{x\, dx}{i\hbar}\,\hat{p}_x + dx + \frac{dx^2\,\hat{p}_x}{i\hbar}\right\}|x, y, z\rangle \simeq \left\{x + dx + \frac{x\, dx\, \hat{p}_x}{i\hbar}\right\}|x, y, z\rangle$$

حاصل می‌شود . رابطه فوق (۳ــ۸۵) را برقرار و قضیه ۸ را ثابت می‌کند .

معادله (۳ــ۸۴) را می‌توان ، با نوشتن آن به‌صورت

$$\hat{p}_x|x, y, z\rangle = \frac{i\hbar(|x + dx, y, z\rangle - |x, y, z\rangle)}{dx}$$

یا ، در شکل برا ، به‌صورت

$$\langle x, y, z|\hat{p}_x = \frac{-i\hbar(\langle x + dx, y, z| - \langle x, y, z|)}{dx}$$

به‌شکل مفیدتری درآورد . بالاخره عنصر ماتریس به‌صورت

$$\langle x, y, z|\hat{p}_x|a_i\rangle = -\frac{i\hbar(\langle x+dx, y, z|a_i\rangle - \langle x, y, z|a_i\rangle)}{dx}$$

یا

$$\langle \mathbf{r}|\hat{p}_x|a_i\rangle = -\frac{i\hbar(\psi_{a_i}(x+dx, y, z) - \psi_{a_i}(x, y, z))}{dx} = \left(\frac{\hbar}{i}\right)\left(\frac{\partial\psi_{a_i}}{\partial x}\right)$$

در خواهد آمد . به‌طور عمومی‌تر برای عملگر $\hat{\mathbf{p}}$ خواهیم داشت

$$\langle \mathbf{r}|\hat{\mathbf{p}}|a_i\rangle = \frac{\hbar}{i}\nabla\psi_{a_i}$$

یا

$$\langle \mathbf{r}|\hat{G}(\hat{\mathbf{p}})|a_i\rangle = \hat{G}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla\right)\psi_{a_i} \qquad (۸۶-۳)$$

که در آن $\hat{G}(\hbar/i)\nabla)$ عبارت است از تابع عملگری دیفرانسیلی متناظر . بالاخره ، (۳ — ۸۰) به‌صورت معادله ویژه مقداری

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{r}|\hat{A}|a_i\rangle &= \hat{A}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla, \mathbf{r}\right)\psi_{a_i}\\ &= \left\{\hat{G}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla\right) + K(\mathbf{r})\right\}\psi_{a_i}(\mathbf{r}) = a_i\psi_{a_i}(\mathbf{r})\end{aligned} \qquad (۸۷-۳)$$

در می‌آید .

قاعده ــ برای به‌دست‌آوردن عملگر (دیفرانسیلی) مکانیک موجی وابسته به‌یک مشاهده‌پذیر بندادی ، جایگزینی زیر را انجام می‌دهیم

$$\hat{\mathbf{p}} \to \frac{\hbar}{i}\nabla, \qquad \hat{\mathbf{r}} \to \mathbf{r}, \qquad \hat{A}(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{r}}) \to \hat{A}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla, \mathbf{r}\right) \qquad (۸۸-۳)$$

به‌عنوان مثال ، فرض کنیم می‌خواهیم ویژه تابعهای (حالتهای مانا)انرژی هامیلتونی غیرنسبیتی $\mathscr{H} = (\hat{p}^2/2m) + \hat{V}(\hat{\mathbf{r}})$ را پیدا کنیم . نخست عملگر مکانیک موجی

$$\mathscr{H} = \frac{\frac{\hbar}{i}\nabla \cdot \frac{\hbar}{i}\nabla}{2m} + V(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})$$

را تشکیل می‌دهیم و سپس معادله ویژه مقداری

$$\mathscr{H}\psi_{\varepsilon_i} = \varepsilon_i \psi_{\varepsilon_i}$$

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right\}\psi_{\varepsilon_i}(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \psi_{\varepsilon_i}(\mathbf{r})$$

را برای ویژه تابعها و ویژه مقدارهای انرژی حل می‌کنیم .

عناصر ماتریس که به‌شکل $\langle\alpha|\hat{A}|\beta\rangle$ هستند می‌توانند به‌طور کاملا" ساده‌ای درمکانیک موجی‌محاسبه شوند .با استفاده از رابطه کامل‌بودن $\int |\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}|\, d\mathbf{r} = \hat{1}$ و (۳–۸۷)می‌نویسیم

$$\langle\alpha|\hat{A}|\beta\rangle = \int \langle\alpha|\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}|\hat{A}|\beta\rangle\, d\mathbf{r} = \int \Psi_\alpha^*(\mathbf{r})\hat{A}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla, \mathbf{r}\right)\Psi_\beta(\mathbf{r})\, d\mathbf{r} \quad (۳-۸۹)$$

قاعده ــ عنصر ماتریس $\langle\alpha|\hat{A}|\beta\rangle$ با تاثیردادن عملگر $\hat{A}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla, \mathbf{r}\right)$ روی $\Psi_\beta(\mathbf{r})$ و ضرب آن در $\Psi_\alpha^*(\mathbf{r})$ و انتگرال‌گیری روی تمام‌فضا به‌دست می‌آید .

به‌عنوان مثال ، عنصر $\langle\alpha|\hat{\mathbf{p}}|\beta\rangle$ در مکانیک موجی به‌صورت زیر محاسبه می‌شود

$$\langle\alpha|\hat{\mathbf{p}}|\beta\rangle = \int \Psi_\alpha^*(\mathbf{r})\frac{\hbar}{i}\nabla\Psi_\beta(\mathbf{r})\, d\mathbf{r}$$

۱۳ــ معادله موج شرودینگر

در مکانیک موجی ، حالت یک سیستم توسط *تابع حالت*

$$\Psi_\beta(\mathbf{r}, t) = \langle\mathbf{r}|\beta, t\rangle$$

نمایش داده می‌شود . وقتی بردار حالت می‌چرخد ، تابع حالت با زمان از مقدار اولیه‌اش $\Psi_\beta(\mathbf{r}, t_0) = \langle\mathbf{r}|\beta, t_0\rangle$ ، متحول می‌شود . می‌توان ، با استفاده از تصویر شرودینگر ،که در آن بردار حالت در رابطه

$$\mathscr{H}|\beta, t\rangle = i\hbar \frac{d|\beta, t\rangle}{dt}$$

صدق می‌کند ،معادله حرکتی برای تابع حالت به‌دست آورد . با ضرب داخلی دوطرف رابطه فوق در $\langle \mathbf{r}|$ خواهیم داشت

$$\langle \mathbf{r}|\mathscr{H}|\beta, t\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\langle \mathbf{r}|\beta, t\rangle$$

یا

$$\mathscr{H}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla, \mathbf{r}\right)\Psi_\beta(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi_\beta(\mathbf{r}, t)$$

با به‌کاربردن هامیلتونی به‌شکل عمومی $\mathscr{H} = (\hat{p}^2/2m) + V(\hat{\mathbf{r}})$ معادله موج شرودینگررابرای تابع حالت (یا موج) $\Psi_\beta(\mathbf{r}, t)$ به‌صورت زیر به‌دست خواهیم آورد

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi_\beta + V(\mathbf{r})\Psi_\beta = i\hbar\frac{\partial\Psi_\beta}{\partial t} \qquad (۹۰-۳)$$

در حالی که خود Ψ_β مختلط و غیرقابل اندازه‌گیری است ،توان دوم قدرمطلق آن با احتمال یافتن ذره درنواحی مختلف فضا مرتبط است . این واقعیت که Ψ_β در یک معادله موجی‌صدق می‌کند بیانگر وجود کیفیت‌های موج مانندی در ماده است که در فصل ۱ مورد بحث قرار گرفت . اکنون خواهیم دید که تابع موج یک ذره آزاد در اصل همان چیزی است که دوبروی در نظریه ابتدائی‌تر خود به‌آن اشاره کرده بود .

چون معادله موج نسبت به‌زمان از مرتبه‌اول است ، تنها مقدار اولیه $\Psi_\beta(\mathbf{r}, t_0)$ برای تعیین تحول تابع حالت کافی است . جواب معادله موج به‌آسانی ، با ضرب داخلی دوطرف (۳-۶۵) ، که عبارت است از

$$|\beta, t\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\beta, t_0\rangle$$

در $\langle \mathbf{r}|$ به‌صورت زیر به‌دست می‌آید .

$$\Psi_\beta(\mathbf{r}, t) = \langle \mathbf{r}|\beta, t\rangle = \langle \mathbf{r}|\hat{U}(t, t_0)|\beta, t_0\rangle$$

این رابطه می‌تواند با استفاده از رابطه بستاری $\int d\mathbf{r}'|\mathbf{r}'\rangle\langle\mathbf{r}'| = \hat{1}$ به‌صورت زیر بیان شود

$$\Psi_\beta(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{r}'\langle\mathbf{r}|\hat{U}(t, t_0)|\mathbf{r}'\rangle\langle\mathbf{r}'|\beta, t_0\rangle \qquad (۹۱-۳)$$

با تعریف هسته انتشار یا *انتشاردهنده* به‌وسیله

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') = \langle\mathbf{r}|\hat{U}(t, t')|\mathbf{r}'\rangle \qquad (۹۲-۳)$$

(۳-۹۱) می‌تواند به‌صورت زیر بیان شود

$$\Psi_\beta(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{r}' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t_0)\Psi_\beta(\mathbf{r}', t_0) \qquad (۹۳-۳)$$

با استفاده از $\hat{U} = \exp(-i\mathscr{H}(t - t_0)/\hbar)$ ، بستگی G به هامیلتونی کاملا" روشن می‌شود. وقتی هامیلتونی‌معلوم و تابع حالت اولیه مشخص باشد ، تابع موج در زمانهای بعد می‌تواند با استفاده از (۳-۹۳) محاسبه شود .

محاسبه انتشاردهنده G به‌شکل بسته از رابطه تعریف کننده (۳-۹۲) معمولا" مشکل است .اگر شرط کامل‌بودن ویژه پایه $\mathscr{H}$ ،یعنی $\sum_i |\varepsilon_i\rangle\langle\varepsilon_i| = \hat{1}$ را به‌کار ببریم بسط بمسری آن امکان‌پذیر خواهد بود . با قراردادن

$$\hat{U} = \exp[-i\mathscr{H}(t - t_0)/\hbar]$$

(۳-۹۲) خواهد شد

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') &= \sum_i \langle\mathbf{r}|\exp[-i\mathscr{H}(t - t_0)/\hbar]|\varepsilon_i\rangle\langle\varepsilon_i|\mathbf{r}'\rangle \\ &= \sum_i \exp[-i\varepsilon_i(t - t_0)/\hbar]\langle\mathbf{r}|\varepsilon_i\rangle\langle\varepsilon_i|\mathbf{r}'\rangle \qquad (۹۴-۳) \\ &= \sum_i \exp[-i\varepsilon_i(t - t_0)/\hbar]\psi_{\varepsilon_i}(\mathbf{r})\psi^*_{\varepsilon_i}(\mathbf{r}') \end{aligned}$$

وقتی که ویژه مقدارها و ویژه تابعهای هامیلتونی پیدا شدند ، انتشاردهنده می‌تواند با استفاده از (۳-۹۴) ساخته شود .

۱۴ ــ معادله موج شرودینگر و جریان احتمال

به‌تدریج که تابع حالت با زمان تحول می‌یابد ، چگالی احتمال وابسته به‌سیستم در سرتاسر فضا تغییر می‌کند . چون احتمال کلی همیشه برابر با یک است ، چگالی از یک ناحیه به‌ناحیه دیگر ، خیلی شبیه به‌یک سیال ، جریان پیدا می‌کند .

ارتباط بین جریان احتمال و معادله شرودینگر با کاربرد این معادله ،

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right\}\Psi_\beta = i\hbar\frac{\partial\Psi_\beta}{\partial t}$$

و مزدوج آن ،

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right\}\Psi_\beta{}^* = -i\hbar\frac{\partial\Psi_\beta{}^*}{\partial t}$$

برقرار می‌شود . با ضرب معادله اول در $\Psi_\beta{}^*$ ، و معادله دوم در Ψ_β ، و کم‌کردن آنها از یکدیگر ، خواهیم داشت

$$\frac{-\hbar^2}{2m}(\Psi_\beta{}^*\nabla^2\Psi_\beta - \Psi_\beta\Delta^2\Psi_\beta{}^*) = i\hbar\left(\Psi_\beta{}^*\frac{\partial\Psi_\beta}{\partial t} + \Psi_\beta\frac{\partial\Psi_\beta{}^*}{\partial t}\right)$$

یا به‌طور معادل

$$\nabla\cdot\frac{i\hbar}{2m}(\Psi_\beta{}^*\nabla\Psi_\beta - \Psi_\beta\nabla\Psi_\beta{}^*) = \frac{\partial}{\partial t}|\Psi_\beta|^2 \qquad (۹۵-۳)$$

با تعریف *شار احتمال* یا بردار جریان احتمال به‌وسیله

$$\mathbf{J}_\beta(\mathbf{r},t) = \frac{-i\hbar}{2m}(\Psi_\beta{}^*\nabla\Psi_\beta - \Psi_\beta\nabla\Psi_\beta{}^*) \qquad (۹۶-۳)$$

و استفاده از تعریف چگالی احتمال ، $\mathscr{P}_\beta(\mathbf{r},t) = |\Psi_\beta|^2$ ، معادله (۳ــ۹۵) به‌صورت یک معادله پیوستگی در می‌آید ، یعنی ،

$$\nabla\cdot\mathbf{J}_\beta + \frac{\partial\mathscr{P}_\beta}{\partial t} = 0 \qquad (۹۷-۳)$$

معادله (۳ـ۹۷) ایجاب می‌کند که احتمال به‌طورموضعی پایسته باشد ، یعنی ، نه‌ایجادمی‌شود و نه از بین می‌رود . به‌بیان دیگر ، هر کاهش (یا افزایش) احتمال به‌ناحیه‌ای از فضا با یک جریان خروجی (یا جریان ورودی) احتمال همراه است ، هم‌چنین ، اگر سیستم در یک‌حالت مانا باشد ، $\partial\mathscr{P}_\beta/\partial t = 0$ و جریان احتمال سیملوله‌ای است ، یعنی ، $\nabla\cdot\mathbf{J}_\beta = 0$. اگر تابع حالتی حقیقی باشد ، در این صورت از (۳ـ۹۶) نتیجه می‌شود که $\mathbf{J} = \mathbf{0}$.

توجه کنیم که نتیجه‌گیری معادله پیوستگی برای جریان احتمال بستگی به‌حقیقی‌بودن تابع انرژی پتانسیل دارد .در حالی که پتانسیلهای مختلط، به‌خاطر این که به‌ویژه‌مقدارهای مختلط انرژی منجر می‌شوند ، قدری غیرفیزیکی هستند ، مع ذالک به‌طور گسترده‌ای در مدل سازی برهم‌کنشهای هسته‌ای مورد استفاده قرار گرفته‌اند . تحقیق این که قسمت موهومی پتانسیل مستقیما" منجر به‌یک جمله فروکشنده در (۳ـ۹۷) می‌شود ، که به‌نوبه خود منجر به کاهش احتمال می‌شود ، ساده است (مسئله ۳ ـ ۱۴) . این کاهش احتمال‌به‌عنوان جذب ذرات توسط هسته‌ها تعبیر می‌شود .

محدودیتهائی وجود دارند که باید به‌تابع حالت یک سیستم تحمیل شوند ،زیرا توان دوم آن معرف یک چگالی احتمال است . این محدودیتها در اصل موضوع زیر گنجانده شده‌اند .

اصل موضوع ۷ـ یک تابع حالت ، که نمایانگر یک سیستم فیزیکی حقیقی است ، و مشتق آن باید در همه‌جا متناهی ، پیوسته*، و تک مقداری باشند .

درفصل ۴ توجه خود را به‌ویژه تابعهای مانا و ویژه مقدارهای (انرژی) هامیلتونی‌های یک بعدی گوناگونی معطوف می‌کنیم . چون با سیستمهای تک ذره‌ای سروکار خواهیم داشت ، نمایش مکانیک موجی مورداستفاده قرارخواهد گرفت .درجدول (۳ـ۱) ارتباط بین صورتبندی دیراک و مکانیک موجی شرودینگر خلاصه شده است . ویژگی آخر (کامل‌بودن) با کاربرد

$$\langle\mathbf{r}|\sum_i |a_i\rangle\langle a_i|\ |\mathbf{r}'\rangle = \langle\mathbf{r}|\hat{1}|\mathbf{r}'\rangle$$
$$\sum_i \psi^*_{a_i}(\mathbf{r}')\psi_{a_i}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$$

برقرار می‌شود .

---

* در وضعیت غیرفیزیکی که تابع انرژی پتانسیل یک ناپیوستگی بینهایت دارد ، شرط پیوستگی روی مشتق Ψ_β بایستی رها شود .

جدول (۳ـ۱): ارتباط بین صورتبندیهای دیراک (برداری) و شرودینگر (تابعی) مکانیک کنتومی در نمایش مختصه‌ای (مکانیک موجی).

	مکانیک‌کوانتومی در یک فضای‌برداری	مکانیک‌کوانتومی درنمایش‌مختصه‌ای (مکانیک موجی)
عملگر	$\hat{A}(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{r}})$	$\hat{A}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla, \mathbf{r}\right)$
حالت مشخصه	$\lvert a_i\rangle, \langle a_i\rvert$	$\psi_{a_i}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r}\lvert a_i\rangle,\ \psi^*_{a_i}(\mathbf{r}) = \langle a_i\lvert \mathbf{r}\rangle$ (ویژه تابعها)
ویژه مقدار	a_i	a_i
معادله ویژه مقداری	$\hat{A}\lvert a_i\rangle = a_i\lvert a_i\rangle$	$\hat{A}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla, \mathbf{r}\right)\psi_{a_i}(\mathbf{r}) = a_i\,\psi_{a_i}(\mathbf{r})$
حالت غیرمشخص	$\lvert\beta, t\rangle, \langle\beta, t\rvert$	$\Psi_\beta(\mathbf{r}, t) = \langle \mathbf{r}\lvert\beta, t\rangle,\ \Psi_\beta^*(\mathbf{r}, t) = \langle\beta, t\lvert \mathbf{r}\rangle$
حاصل‌ضرب داخلی	$\langle\alpha\lvert\beta\rangle$	$\int \psi_\alpha^*(\mathbf{r})\psi_\beta(\mathbf{r})\,d\mathbf{r}$
عنصر ماتریس	$\langle\alpha\lvert\hat{A}\rvert\beta\rangle$	$\int d\mathbf{r}\psi_\alpha^*(\mathbf{r})\hat{A}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla, \mathbf{r}\right)\psi_\beta(\mathbf{r})$
ویژگی هرمیتی	$\langle\alpha\lvert\hat{A}\rvert\beta\rangle = (\langle\beta\lvert\hat{A}\rvert\alpha\rangle)^*$	$\int d\mathbf{r}\psi_\alpha^*(\mathbf{r})\hat{A}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla, \mathbf{r}\right)\psi_\beta(\mathbf{r}) = \left[\int d\mathbf{r}\psi_\beta^*(\mathbf{r})\hat{A}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla, \mathbf{r}\right)\psi_\alpha\right]^*$
معادله حرکت شرودینگر	$\hat{\mathscr{H}}(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{r}})\lvert\beta, t\rangle = i\hbar\frac{d\lvert\beta, t\rangle}{dt}$	$\hat{\mathscr{H}}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla, \mathbf{r}\right)\Psi_\beta(\mathbf{r}, t) = i\hbar\frac{\partial\Psi_\beta(\mathbf{r}, t)}{\partial t}$
تحول زمانی یک ویژه‌حالت انرژی	$\lvert\varepsilon_i, t\rangle = \exp\left[-\frac{i\varepsilon_i(t-t_0)}{\hbar}\right]\lvert\varepsilon_i, t_0\rangle$	$\Psi_{\varepsilon_i}(\mathbf{r}, t) = \exp\left[-\frac{i\varepsilon_i(t-t_0)}{\hbar}\right]\Psi_{\varepsilon_i}(\mathbf{r}, t_0)$
تحول زمانی یک حالت غیرمشخص	$\lvert\beta, t\rangle = \exp\left[-\frac{i\hat{\mathscr{H}}(t-t_0)}{\hbar}\right]\lvert\beta, t_0\rangle$	$\Psi_\beta(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{r}' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t-t_0)\Psi_\beta(\mathbf{r}', t_0)$
بسط	$\lvert\beta\rangle = \sum_i \beta^{(a_i)}\lvert a_i\rangle$ با $\beta^{(a_i)} = \langle a_i\lvert\beta\rangle$	$\psi_\beta(\mathbf{r}) = \sum_i \beta^{(a_i)}\psi_{a_i}(\mathbf{r})$ با $\beta^{(a_i)} = \int \psi^*_{a_i}(\mathbf{r})\psi_\beta(\mathbf{r})\,d\mathbf{r}$
رابطه کامل‌بودن	$\sum_i \lvert a_i\rangle\langle a_i\rvert = \hat{1}$	$\sum_i \psi^*_{a_i}(\mathbf{r}')\psi_{a_i}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$

مسائل

۳ـ۱ (الف) ویژه‌مقدارها و یک مجموعه از ویژه‌بردارهای راست‌هنجار ماتریس هرمیتی

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

را پیدا کنید.

(ب) تحقیق کنید که ویژه‌بردارها متعامداند.

۳ـ۲ ماتریس زیر را در نظر بگیرید

$$\hat{B} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

(الف) نشان دهید که این ماتریس با ماتریس $\hat{A}$ ی داده شده در مسئله (۳ـ۱) جابه‌جاپذیر است.

(ب) حداقل یک مجموعه از ویژه‌بردارهای راست‌هنجار مشترک $\hat{A}$ و $\hat{B}$ را پیدا کنید.

(ج) ماتریسها را در این ویژه پایه مشترک نمایش دهید.

۳ـ۳ با استفاده از قواعد جبر برا ـ کت تحقیق کنید که به‌طور کلی داریم

$$(\hat{A}\hat{B})^{\dagger} = \hat{B}^{\dagger}\hat{A}^{\dagger} \qquad \text{و} \qquad (\hat{A}\hat{B})^{-1} = \hat{B}^{-1}\hat{A}^{-1}$$

۳ـ۴ یک مجموعه بردار راست‌هنجار در یک پایه داده شده در نظر بگیرید

$$|\beta_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \qquad |\beta_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}; \qquad |\beta_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

(الف) ماتریسهای تصویرگر متناظر $\hat{P}_1$ ، $\hat{P}_2$ و $\hat{P}_3$ را پیدا کنید.

(ب) نشان دهید که $\hat{P}_1 + \hat{P}_2 + \hat{P}_3 = \hat{1}$.

(ج) فرض کنید

$$|a\rangle = \begin{pmatrix}1\\1\\1\end{pmatrix}$$

تحقیق کنید که $\hat{P}_2$ آنرا روی $|\beta_2\rangle$ تصویر می‌کند ، یعنی ، $\hat{P}_2|a\rangle = (\langle\beta_2|a\rangle)|\beta_2\rangle$.

۳ــ۵ توضیح دهید چرا رابطه $e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}$ برای هر عملگری معتبر نیست . تحت چه شرایطی رابطه‌مذکور برقرار است ؟ ماتریس $e^{\lambda\hat{A}}$ را تا مرتبهٔ λ^2 برای

$$\hat{A} = \begin{pmatrix}1 & 2\\2 & 1\end{pmatrix}$$

بیان کنید .

۳ــ۶ اتحاد برداری

$$\langle\gamma|\gamma\rangle\langle\delta|\delta\rangle - |\langle\gamma|\delta\rangle|^2 \equiv \langle\beta|\beta\rangle\langle\delta|\delta\rangle$$

را که در آن

$$|\beta\rangle = |\gamma\rangle - \left[\frac{\langle\delta|\gamma\rangle}{\langle\delta|\delta\rangle}\right]|\delta\rangle$$

تحقیق‌کنید . از این اتحاد برای اثبات نامساوی شوارتز ، (۳ــ۵۷) ، استفاده‌کنید .

۳ــ۷ با استفاده از رابطه جابه‌جائی $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar\hat{1}$ ، رابطه

$$\hat{p}_x = \frac{m}{i\hbar}[\hat{x}, \mathscr{H}]$$

را ، که در آن $\mathscr{H}$ هامیلتونی‌ای به‌شکل

$$\mathscr{H} = \frac{\hat{p}_x^{\,2}}{2m} + \mathcal{V}(\hat{x})$$

است ، تحقیق کنید .

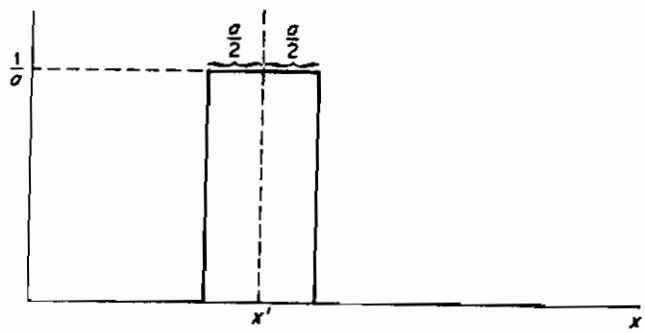
۳ــ۸ نشان دهید که برای هرحالت مقید مانا داریم $\langle p_x\rangle_n = 0$. (راهنمائی : مقدار قابل انتظار دوطرف رابطه به‌دست آمده در مسئله (۳ــ۷) را برای یک ویژه حالت $\mathscr{H}$ ، به‌عنوان مثال ، $|\varepsilon_n\rangle$ ، به‌دست آورید.)

۳ـ۹ با استفاده از قواعد ضرب ماتریسها نشان دهید که در فضای سه‌بعدی داریم

$$\mathrm{Tr}\,\hat{A}\hat{B} = \mathrm{Tr}\,\hat{B}\hat{A}$$

۳ـ۱۰ تابعی را (شکل ۳ـ۳) که با

$$f(x, x') = 1/a \qquad -\tfrac{1}{2}a + x' \leqslant x \leqslant \tfrac{1}{2}a + x'$$
$$= 0 \ (\text{در جاهای دیگر})$$



شکل (۳ـ۳)

تعریف می‌شود در نظر بگیرید .

(الف) نشان دهید که وقتی $a \to 0$ ، این تابع به‌تابع دلتای دیراک تبدیل می‌شود ، یعنی

$$\lim_{a\to 0} f(x, x') \to \delta(x - x')$$

(ب) با به‌کارگیری $g(x) = bx^2$ تحقیق کنید که این تابع دلتا دارای ویژگی "غربالی" زیر است

$$g(x') = \int_{-\infty}^{\infty} g(x)\,\delta(x - x')\,dx$$

(راهنمائی: انتگرال‌گیری را برای مقدار متناهی a انجام دهید و سپس قرار دهید $a \to 0$.)

۳ـ۱۱ نشان دهید که اگر یک کت حالت را در مقدار اولیه‌اش نگاه داریم ، یعنی ، $|\beta\rangle \equiv |\beta, 0\rangle$ ، می‌توانیم شکل کلاسیکی معادله حرکت برای $\langle A(t)\rangle$ در معادله (۳ـ۶۱) را محفوظ نگاه داریم به‌شرط این که فرض کنیم عملگرها طبق

$$\hat{A}_H(t) = e^{i\mathscr{H}t/\hbar}\hat{A}e^{-i\mathscr{H}t/\hbar}$$

تغییر کنند . در اینجا $\hat{A}_H(t)$ و $\hat{A}$ به‌ترتیب عملگرها در تصویر هایزنبرگ وتصویر شرودینگر هستند (رک پیوست ب)

۳ـ۱۲ با تاثیر دوطرف

$$\left[x, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right] = i\hbar\hat{1}$$

روی یک تابع دلخواه ψ نشان دهیدکه رابطه به‌دست آمده در مکانیک موجی‌برقرار است .

۳ـ۱۳ عملگر $1/\hat{p}_x$ را در نظر بگیرید . روی شکل عمومی این عملگر در مکانیک موجی‌بحث کنید . (راهنمائی: عملگری را پیدا کنید که در رابطه

$$\frac{1}{\hat{p}_x}\psi(x) = \varphi(x)$$

صدق کند مشروط بر آنکه داشته باشیم $\varphi(-\infty) = 0$.همین کار را با تاثیردادن $\hat{p}_x$ روی دو طرف انجام دهید.

۳ـ۱۴ نشان دهید که اگر پتانسیل تابع مختلطی باشد یک جمله فروکشنده به‌شکل

$$\text{احتمال جذب} = -2\,\mathrm{Im}\; V|\Psi|^2/\hbar$$

در (۳ـ۹۷) ظاهر می‌شود .

مراجع پیشنهادی

Borowitz, S., "Fundamentals of Quantum Mechanics." Benjamin, New York, 1967.

Dirac, P. A. M., "The Principles of Quantum Mechanics," 4th ed., 1958. Oxford Univ. Press, London and New York, 1958.
(This text is one of the great classic works on modern quantum theory. While it is mathematically sophisticated it is nevertheless unique in its approach, style, and notation, and much of the material in Chapter 3 can be found in Dirac's book.)

Feynman R. P., Leighton, R. B., and Sands, M., "The Feynman Lectures on Physics," Vol. 3. Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1964.

Gottfried, K., "Quantum Mechanics," Vol. I. Benjamin, New York, 1966.

Merzbacher, E. "Quantum Mechanics," 2nd ed. Wiley, New York, 1970.

Messiah, A., "Quantum Mechanics," Vol. I. Wiley, New York, 1958.

Stehle, P. "Quantum Mechanics." Holden-Day, San Francisco, 1966.

۴

مکانیك موجی در یك بعد

هرسیستم فیزیکی به‌وسیله هامیلتونی آن ، که معمولا" توسط تابع انرژی پتانسیل $V(\mathbf{r})$ تعیین می‌شود ، مشخص می‌گردد . برای روشن‌کردن نظرات مطرح شده در فصل ۳ ، خواص سیستمهای یک‌ذره‌ای یک‌بعدی را که هامیلتونی آنها مستقل از زمان است ، با تأکید خاصی بر روی جوابهای ویژه حالت مانا موردبررسی قرار می‌دهیم . ویژه حالتهای مانا ، به‌دلائل زیر ، دارای اهمیتی اساسی هستند :

(الف) هر حالت دارای یک انرژی مشخصهٔ ε_i است .

(ب) اگر سیستم درآغاز در چنین حالتی باشد ، تا ابد دراین حالت‌باقی‌خواهد ماند .

(ج) وقتی ویژه مقدارها و ویژه تابعهای انرژی به‌دست آمدند ، انتشاردهنده $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t_0)$ می‌تواند با استفاده از (۳ـ۹۳) ساخته شده ، و تحول حالتهای غیرمشخص تعیین شود .

۱ ـ طبقه‌بندی حالتهای مانا در مکانیک موجی

ویژه‌تابعها و ویژه مقدارهای حالتهای مانا به‌وسیله جوابهای معادله‌شرودینگر* (معادله ویژه‌مقداری انرژی)

---

* معادله شرودینگر مستقل از زمان نباید با معادله موج شرودینگر (معادله وابسته به‌زمان) (۳ـ۹۰) اشتباه شود .

$$\mathscr{H}\psi_{\varepsilon_i}(\mathbf{r}) = \left\{-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + V(\mathbf{r})\right\}\psi_{\varepsilon_i}(\mathbf{r}) = \varepsilon_i\psi_{\varepsilon_i}(\mathbf{r}) \qquad (۱-۴)$$

تعیین می‌شوند .

یک حالت را ، بسته به‌اینکه تابع متناظر (یا چگالی احتمال) آن در بینهایت صفر باشد یا نه مقید یا نا مقید گوئیم . اگر تابع حالت وابسته به $|\beta\rangle$ دارای ویژگی

$$\lim_{r\to\infty}\langle\mathbf{r}|\beta\rangle = \lim_{r\to\infty}\Psi_\beta(\mathbf{r}) \to 0 \qquad (۲-۴)$$

باشد حالت مقید است ، در غیر این‌صورت نامقید .به‌زودی خواهیم دید که قاعده‌زیربرقرار است .

قاعده ــ یک ویژه حالت انرژی عموما" جزء یک طیف گسسته‌است اگر مقید باشد ، و جزء یک طیف پیوسته است اگر نامقید باشد .

هم‌چنین داشتن قاعده‌ای که نوع طیف وابسته به‌یک هامیلتونی معین را تعیین کند مهم است .

قاعده ــ ویژه حالتهای یک عملگر هامیلتونی ، بسته به‌اینکه همتای کلاسیکی آن مربوط به مدارهای مقید باشد یا نه ، مقید (گسسته)اند یا نامقید (پیوسته) .

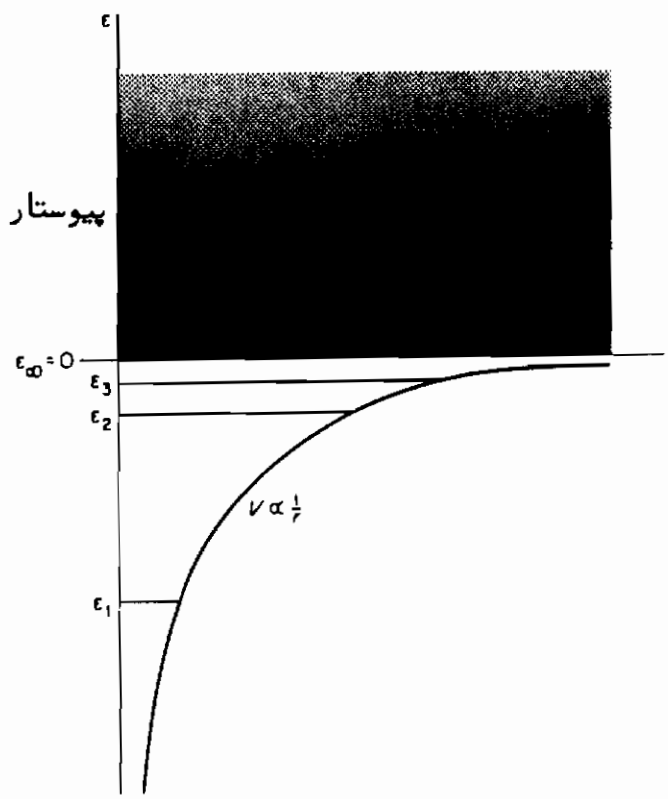
به‌عنوان مثال ، از نظر کلاسیکی ، ذره آزادی که توسط هامیلتونی با $V = 0$ اداره‌می‌شود روی یک خط مستقیم با سرعت ثابت حرکت می‌کند و سرانجام تا بینهایت می‌رود.هامیلتونی مکانیک کوانتومی متناظر آن دارای فقط یک طیف پیوسته است . از طرف دیگر ، هامیلتونی کلاسیکی نوسانگر $(V = \frac{1}{2}kr^2)$ ،صرفنظر از مقدار انرژی ،فقط حرکات مقیدرا مجازمی‌داند . برای تمام انرژیهای معین ،یک جا به‌جایی بیشینه‌ای از مبداء به‌نام دامنه نوسان وجود دارد . در نتیجه ، نوسانگر کوانتومی شامل فقط حالتهای مقید بوده و برای تمام انرژیها دارای یک طیف گسسته است . هامیلتونی کپلری یا کولنی $(V = -k/r)$ برای $\varepsilon < 0$ حرکات مقید (بیضی) و برای $\varepsilon \geq 0$ حرکات‌نامقید (سهمی و هذلولی) را به‌دست می‌دهد .بنابراین باید برای $\varepsilon < 0$ یک طیف گسسته و برای $\varepsilon \geq 0$ یک طیف پیوسته انتظار داشته باشم* .

نظریه‌های وابسته به‌ویژه حالتهای مانای مقید و نامقید به‌طور اساسی با یکدیگر متفاوتند .برای حالتهای مقید ،صفرشدن ویژه تابعها دربینهایت مستقیما" به‌یک طیف گسسته

---

* در اینجا ε معرف انرژی است و نباید با خروج از مرکز تعریف شده در فصل ۲اشتباه‌شود.

منجرمی‌شود .لذا مسئله عبارت‌است از پیداکردن ویژه تابعها وویژه‌مقدارهای انرژی‌متناظر آنها و محاسبه مقادیر قابل انتظار عملگرهای متناظر با مشاهده‌پذیرهای مختلف . از طرف دیگر ، برای حالتهای نامقید ، ویژه‌مقدارهای انرژی پیوسته‌اند ، یعنی ، کوانتیده نیستند . به‌علاوه ، شکل ویژه تابعهای مربوط به‌حالتهای نامقید معمولا" منجر به‌روشهای بهنجارشی می‌شود که مقادیر قابل‌انتظار بعضی عملگرها را نامعین باقی می‌گذارد . مهمترین آنها ، *جریان احتمال* است زیرا این جریان به‌حالت ایستای فرایند پراکندگی ارتباط دارد .درواقع همان‌طور که در فصل ۸ خواهیم دید ، نسبت بین شارهائی که در جهات مختلف و نواحی مختلف فضا عبورمی‌کنند مقطع موثر پراکندگی یک فرایند برخورد را تعیین می‌کند . به‌این دلیل حالتهای نامقید یا حالتهای‌پیوسته ، *حالتهای پراکندگی* نیز نامیده می‌شوند .



شکل (۴ـ۱) طیف مقید (گسسته) برای $\varepsilon < 0$ و نامقید (پیوسته) برای $\varepsilon > 0$ ، وابسته به‌انرژیهای با پتانسیل $1/r$.

در موردی‌که ممکن نباشد بخواهیم‌که ویژه‌تابع مربوط به‌یک حالت نامقید دربینهایت صفرشود ، لازم است که بعضی شرایط مجانبی را که به‌وسیله آزمایش خاص پراکندگی‌پیشنهاد می‌شوند تحمیل کنیم . این شرایط طبیعت عمومی ویژه تابع را وقتی به‌بینهایت نزدیک می‌شویم معین می‌کنند .

اکنون‌مسئله ویژه مقداری انرژی برای سیستمهای یک‌بعدی را بررسی خواهیم کرد . در حالی که مسائل یک‌بعدی معمولا" بیانگر فقط تقریبهایی از وضعیتهای فیزیکی هستند ، در اینجا اصولا"به‌این جهت آنها را موردبحث قرار می‌دهیم که فن ریاضیاتی مکانیک‌کوانتومی را جلوه‌گر می‌کنند . این مسائل اغلب اوقات به‌آسانی می‌توانند به‌مسائل سه‌بعدی تعمیم داده شوند . بحث ما با حالتهای پیوسته هامیلتونی‌ها در یک بعد شروع می‌شود و ارتباط آنها را با پراکندگی از سدهای پتانسیل بررسی می‌کند .

۲ ــ ذره آزاد در یک بعد

با درنظرگرفتن یک ذره آزاد ، یعنی ذره‌ای که برای آن $V = 0$ است ، شروع می‌کنیم . هامیلتونی این سیستم عبارت است از $\mathscr{H} = \hat{p}^2/2m$ و منجر به‌معادله ویژه مقداری انرژی شرودینگر ، یعنی

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi = \varepsilon\psi$$

یا

$$\psi'' + k^2\psi = 0 \qquad , \qquad k = \left(\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}\right)^{1/2}$$

می‌شود . این معادله دارای دوجواب مستقل خطی

$$\psi_k{}^+ = e^{ikx} \qquad \text{و} \qquad \psi_k{}^- = e^{-ikx}$$

است .

هردو جواب به‌طور همزمان ویژه تابع عملگر $\hat{p}$ هستند . با تأثیردادن $\hat{p}$ روی $\psi_k{}^\pm$ داریم

$$\hat{p}\psi_k{}^\pm = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\psi_k{}^\pm = \pm\frac{\hbar}{i}ik\psi_k{}^\pm = \pm\hbar k\psi_k{}^\pm$$

به‌طوری که ویژه‌مقدارهای تکانه‌های متناظر عبارتنداز $p^\pm = \pm\hbar k$. بنابراین ، حالت $\psi_k{}^+ = e^{ikx}$ ذره‌ای با تکانه $\hbar k$ را نشان می‌دهد که در جهت مثبت‌محور x حرکت‌می‌کند.

همین‌طور ψ_k^- ذره آزادی با تکانه $-\hbar k$ را نشان می‌دهد که در جهت منفی محور x حرکت می‌کند . هردو حالت در انرژی تبهگن‌اند ، زیرا هردو دارای انرژی

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

هستند .

شار احتمال وابسته به $\psi_k^\pm$ ،از (۳–۹۶) ، عبارت است از

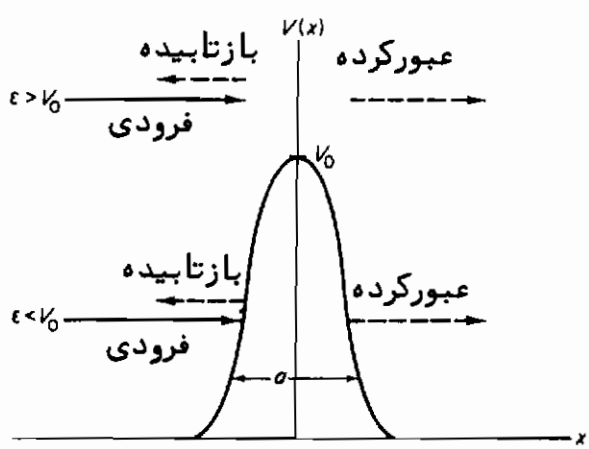
$$J^\pm = -\frac{i\hbar}{2m}\left[\psi_k^{\pm *}\frac{d}{dx}\psi_k^\pm - \psi_k^\pm \frac{d}{dx}\psi_k^{\pm *}\right] = \pm\frac{\hbar k}{m} = \pm\frac{p}{m} = \pm v$$

بنابراین شار برابر است با سرعت ذره و برای ψ_k^+ به‌طرف راست و برای ψ_k^- به‌طرف چپ جریان دارد . جواب عمومی معادله ویژه مقداری انرژی شرودینگر عبارت است از

$$\psi_{gen} = A\psi_k^+ + B\psi_k^-$$

۳ ــ پراکندگی از سدهای یک بعدی

در مسئله پراکندگی یک بعدی ، یک‌باریکه از ذرات از یک جهت معین به‌طرف یک سد پتانسیل $V(x)$ می‌تابد .قسمتی از آن بازتابیده می‌شود و باقیمانده باریکه عبور می‌کند (شکل ۴–۲) .



شکل (۴–۲) پراکندگی از سد یک‌بعدی

سد ممکن است دافعه باشد $(V > 0)$ یا جاذبه $(V < 0)$ ؛با این وجود ،پتانسیلهایی که ما در نظر خواهیم گرفت آنهایی هستند که وقتی $x \to \pm\infty$ به‌سمت صفر میل کنند.بنابر این ذرات باریکه درفاصله‌های زیاد ازمبداء اصولا" آزاد ند . در حالی که شکل سد دارای‌اهمیت ویژه‌ای نیست ، ممکن است از نظر کیفی به‌وسیله یک ارتفاع V_0 و یک پهنای a ، مثل شکل (۴ــ۲) ،مشخص شود .انرژی ذرات باریکه ممکن است بزرگتر یا کوچکتراز V_0 باشد .

ویژه تابعهای انرژی وابسته به‌این پتانسیل از حل معادله شرودینگر یک بعدی

$$\mathscr{H}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}, x\right)\psi_\varepsilon(x) = \left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right\}\psi_\varepsilon(x) = \varepsilon\psi_\varepsilon(x) \qquad (۴-۳)$$

به‌دست می‌آیند . برای حالتهای پراکندگی ، ویژه‌مقدارهای انرژی پیوسته است و (۴ ــ۳)را برای هر $\varepsilon > 0$ حل خواهیم کرد . وقتی $|x| \to \infty$ پتانسیل صفرمی‌شود و می‌توان ثابت‌کرد که e^{ikx} و e^{-ikx} $(k = (2m\varepsilon/\hbar^2)^{1/2})$دوجوابی هستند که به‌طور خطی مستقل‌اند . همان‌طوری که قبلا" نشان داده شد این جوابها معرف ذراتی هستند که به‌ترتیب به‌طرف راست‌وبه‌طرف چپ حرکت می‌کنند .فرض خواهیم‌کرد که باریکه از طرف چپ می‌تابد . در این صورت‌انتظار داریم در فاصله دور در طرف چپ یک باریکه فرودی $(\sim e^{ikx})$ و یک باریکه بازتابیده $(\sim e^{-ikx})$ داشته‌باشیم.امادرفاصله زیاد در طرف راست بایستی فقط یک‌باریکه عبور کرده $(\sim e^{ikx})$ داشته‌باشیم .بنابراین،شرایط‌مجانبی زیررا.به‌جوابهای‌قابل‌قبول (۴ــ۳) تحمیل می‌کنیم

$$\begin{aligned} \psi_\varepsilon(x) &\underset{x\to-\infty}{\sim} A\,e^{ikx} + B\,e^{-ikx} && \text{(فرودی و بازتابیده)} \\ \psi_\varepsilon(x) &\underset{x\to+\infty}{\sim} E\,e^{ikx} && \text{(عبورکرده)} \end{aligned} \qquad (۴-۴)$$

$$\left(k = \left(\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}\right)^{1/2}\right)$$

مسئله پراکندگی به‌پیداکردن آن جوابهای دقیق (برای مقدار داده شده ε) معادله شرودینگر (۴ــ۳) که دارای شکل مجانبی موردنظر باشند تقلیل پیدا می‌کند . وقتی جواب دقیق به‌دست آمد ،و شکل مجانبی برقرارشد ، ضرایب A ، B و E می‌توانند برای پیش‌بینی آهنگی که با آن باریکه بازتابیده می‌شود و یا عبور می‌کند به‌کار روند .

شار فرودی که به‌ویژه تابع مجانبی $\psi_{\text{inc}} = A\,e^{ikx}$ مربوط است ،با استفاده‌از (۳ــ۹۶)، می‌دهد

$$J_{\text{inc}} = \frac{-i\hbar}{2m}\left(\psi^*_{\text{inc}}\frac{d}{dx}\psi_{\text{inc}} - \psi_{\text{inc}}\frac{d}{dx}\psi^*_{\text{inc}}\right) = \frac{\hbar k}{m}|A|^2$$

اعمال این روش به‌توابع بازتابیده و عبور کرده نتیجه می‌دهد

$$J_{\text{refl}} = \frac{\hbar k}{m}|B|^2 \qquad \text{و} \qquad J_{\text{trans}} = \frac{\hbar k}{m}|E|^2$$

مناسب خواهد بود که ضرایب بازتاب و عبور را به‌صورت زیر تعریف کنیم

$$\mathscr{R} = \frac{J_{\text{refl}}}{J_{\text{inc}}} = \left|\frac{B}{A}\right|^2 \qquad (۵-۴)$$

و

$$\mathscr{T} = \frac{J_{\text{trans}}}{J_{\text{inc}}} = \left|\frac{E}{A}\right|^2 \qquad (۶-۴)$$

به‌بیان دقیق‌تر، $\mathscr{R}$ و $\mathscr{T}$ به‌جریان احتمال اشاره دارند، اما، معرف بخشهائی از باریکه فرودی که بازتابیده وعبور کرده‌اند نیز هستند. چون احتمال پایسته است، انتظار داریم که $\mathscr{R} + \mathscr{T} = 1$ باشد. توجه کنیم که $\mathscr{R}$ و $\mathscr{T}$ هم به ε وهم به‌مشخصات سد، V_0 و a، بستگی دارد.

۴ ــ سد مستطیلی

جنبه‌های اساسی پراکندگی در یک بعد را با به‌کاربردن سد پتانسیل مستطیلی، $V(x) = V_0$ برای $0 \leqslant x \leqslant a$ و $V(x) = 0$ برای جاهای دیگر (شکل ۴ــ۳)، روشن می‌سازیم. ناپیوستگی در $x = 0$ و $x = a$ این سد را تا اندازه‌ای غیرفیزیکی می‌سازد. معادله شرودینگر باید در سه‌ناحیه زیر حل شود

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi^{\text{I}}_\varepsilon(x) = \varepsilon\psi^{\text{I}}_\varepsilon(x) \qquad (x < 0)$$

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V_0\right\}\psi^{\text{II}}_\varepsilon(x) = \varepsilon\psi^{\text{II}}_\varepsilon(x) \qquad (0 \leqslant x \leqslant a)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_\varepsilon^{\mathrm{III}}(x) = \varepsilon\psi_\varepsilon^{\mathrm{III}}(x) \qquad (a < x) \qquad (۷-۴)$$

جوابهای "خارجی" به‌آسانی به‌صورت عمومی زیر به‌دست می‌آیند

$$\psi_\varepsilon^{\mathrm{I}}(x) = A\,e^{ikx} + B\,e^{-ikx}$$

$$\left(k = \left(\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}\right)^{1/2}\right) \qquad (۸-۴)$$

$$\psi_\varepsilon^{\mathrm{III}}(x) = E\,e^{ikx} + F\,e^{-ikx}.$$

جواب "داخلی" برای $\varepsilon > V_0$ به‌صورت

$$\psi_\varepsilon^{\mathrm{II}}(x) = Ce^{ik'x} + De^{-ik'x} \qquad \left(k' = \left(\frac{2m(\varepsilon - V_0)}{\hbar^2}\right)^{1/2}\right) \qquad (\text{۹ الف}-۴)$$

و برای $\varepsilon < V_0$ به‌صورت

$$\psi_\varepsilon^{\mathrm{II}}(x) = C^{Kx} + D^{-Kx} \qquad \left(K = \left(\frac{2m(V_0 - \varepsilon)}{\hbar^2}\right)^{1/2}\right) \qquad (\text{۹ ب}-۴)$$

به‌دست می‌آید .

مشاهده می‌کنیم که شرط مجانبی $\psi_\varepsilon \underset{x\to\infty}{\sim} e^{ikx}$ فقط وقتی می‌تواند تأمین شود که در ناحیه III داشته باشیم $F = 0$. ضرایب باقی مانده می‌توانند با استفاده از شرایط پیوستگی (اصل موضوع ۷) روی ψ_ε ، مبنی براینکه ψ_ε و مشتق آن باید در $x = 0$ و $x = a$ پیوسته باشند ، محاسبه شوند . بنابراین برای پنج ضریب باقی‌مانده به‌چهار معادله خواهیم رسید (جدول ۴-۱) . این معادلات به‌طور یکتائی نسبتهای B/A و E/A را ،که توان دوم آنها به‌ترتیب ضرایب بازتاب و عبور را می‌دهند ، تعیین می‌کنند .

جزئیات محاسبات به‌عنوان تمرین واگذار می‌شود ولی نتایج در زیر آورده می‌شوند . برای $\varepsilon > V_0$ خواهیم داشت

$$\mathscr{R} = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = \frac{\sin^2 k'a}{(4\varepsilon/V_0)(\varepsilon/V_0 - 1)}\left[1 + \frac{\sin^2 k'a}{(4\varepsilon/V_0)(\varepsilon/V_0 - 1)}\right]^{-1}$$

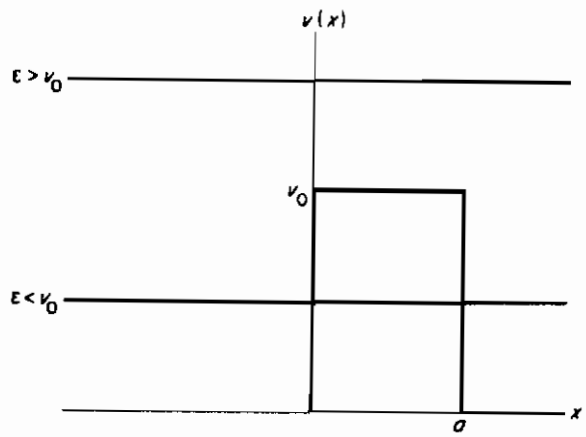
$$\mathscr{T} = \left|\frac{E}{A}\right|^2 = \left[1 + \frac{\sin^2 k'a}{(4\varepsilon/V_0)(\varepsilon/V_0 - 1)}\right]^{-1} \qquad (\text{۱۰ الف}-۴)$$

در حالی که برای $\varepsilon < V_0$ داریم

$$\mathscr{R} = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = \frac{\sinh^2 Ka}{(4\varepsilon/V_0)(1-\varepsilon/V_0)}\left[1+\frac{\sinh^2 Ka}{(4\varepsilon/V_0)(1-\varepsilon/V_0)}\right]^{-1}$$

$$\mathscr{T} = \left|\frac{E}{A}\right|^2 = \left[1+\frac{\sinh^2 Ka}{(4\varepsilon/V_0)(1-\varepsilon/V_0)}\right]^{-1} \qquad (۴-۱۰\text{ ب})$$

خاطرنشان کنیم که $\mathscr{R} + \mathscr{T} = 1$ در هردو مورد برقرار است .



شکل (۴-۳) . سد مستطیلی و دو انرژی پراکندگی ممکن

جدول (۴-۱)
استنتاج چهارمعادله برای A ، B ، C ، D و E با استفاده از شرایط پیوستگی روی ψ_ε (برای $\varepsilon > V_0$) .

$x=0$	$x=a$
$\psi_\varepsilon^{\mathrm{I}}(0) = \psi_\varepsilon^{\mathrm{II}}(0)$ $A + B = C + D$	$\psi_\varepsilon^{\mathrm{II}}(a) = \psi_\varepsilon^{\mathrm{III}}(a)$ $C e^{ik'a} + D e^{-ik'a} = E e^{ika}$
$\psi_\varepsilon'^{\mathrm{I}}(0) = \psi_\varepsilon'^{\mathrm{II}}(0)$ $ik(A - B) = ik'(C - D)$	$\psi_\varepsilon'^{\mathrm{II}}(a) = \psi_\varepsilon'^{\mathrm{III}}(a)$ $ik'(C e^{ik'a} - D e^{-ik'a}) = ikE e^{ika}$

جوابهائی که برای مسئله سد به‌دست آورده‌ایم دارای ویژگیهای جالب زیراند :

(الف) حتی وقتی $\varepsilon > V_0$ باشد بازتاب امکان‌پذیر است . این یک اثر کاملا" مکانیک کوانتومی است و باید به‌رفتار موج مانندی ذره نسبت داده شود . حد کلاسیکی در انرژیهای

تابشی خیلی زیاد* $(\varepsilon/V_0 \gg 1)$ به‌دست می‌آید. در این مورد، (۴ـ۱۰)، همان‌طوری‌که انتظار می‌رود، دقیقاً به $\mathscr{R} \to 0$ و $\mathscr{T} \to 1$ تقلیل می‌یابد.

(ب) حتی وقتی $\varepsilon < V_0$ باشد عبور امکان‌پذیر است، دلیل آن شبیه به‌دلیل مذکور در قسمت (الف) می‌باشد. حد کلاسیکی* در (۴ـ۱۰) برای $V_0/\varepsilon \gg 1$ رخ خواهد داد و، همان‌طور که انتظار می‌رود، منجر به $\mathscr{T} \to 0$ و $\mathscr{R} \to 1$ خواهد شد. امکان نفوذ به‌ناحیه‌ای که از نظر کلاسیکی ممنوع است $(p^2 < 0)$ پدیده مکانیک کوانتومی تونل‌زنی است و در تجربه‌های متعددی مشاهده شده است. توجه کنیم که احتمال یافتن ذره در ناحیه‌ای که از نظر کلاسیکی ممنوع است صفر نیست، با اینکه این احتمال در حد کلاسیکی کوچک می‌شود و به‌سمت صفر میل می‌کند. حالت پراکندگی که توسط (۴ـ۸) و (۴ـ۹) توصیف می‌شود، وضعیتی را نشان می‌دهد که در آن بازتاب و عبور در فاصله بسیار دوری از سد اندازه‌گیری می‌شوند. هر اندازه‌گیری واقعی از مشخصات ذره در ناحیه‌ای که از نظر کلاسیکی ممنوع است، ذره را جایگزیده می‌کند، سد را تغییر می‌دهد، و کل طبیعت مسئله را عوض می‌کند.

(ج) برای $\varepsilon > V_0$، مجموعه‌ای از انرژیهای فرودی وجود دارد که برای آنها $\mathscr{T} = 1$ $(\mathscr{R} = 0)$ و در نتیجه سد برای آنها "نامرئی" می‌شود (شکل ۴ـ۴). از (۴ـ۱۰) نتیجه می‌شود که این انرژیها جوابهای معادله

$$\frac{\sin^2 k_n' a}{4\,\dfrac{\varepsilon_n}{V_0}\left(\dfrac{\varepsilon_n}{V_0} - 1\right)} = 0 \qquad \left(k_n' = \frac{[2m(\varepsilon_n - V_0)]^{1/2}}{\hbar}\right)$$

هستند زیرا در این حالت $\mathscr{T}$ برابر با یک است. طرف چپ وقتی صفر می‌شود که داشته باشیم

$$\frac{2\pi}{\lambda'} a = k_n' a = n\pi \qquad (n = 1, 2, 3, \ldots)$$

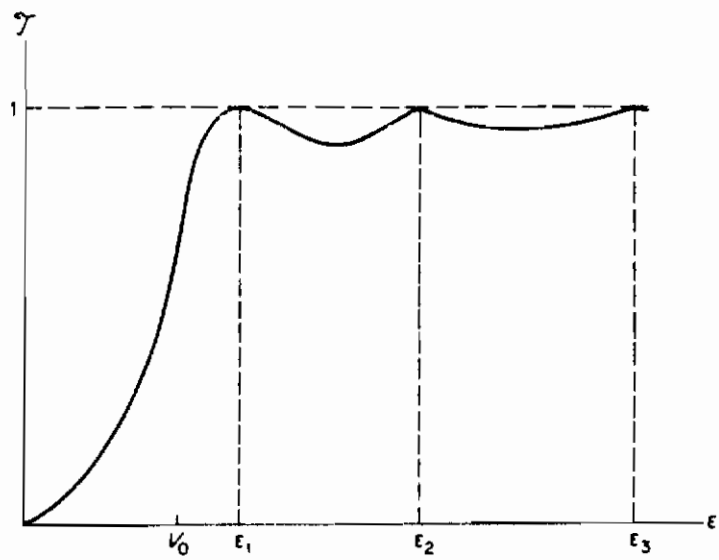
---

* به‌بیان دقیقتر، حد کلاسیکی باید وقتی $\hbar \to 0$ حاصل شود. در این حد انتظار داریم که برای $\varepsilon < V_0$ داشته باشیم $\mathscr{T} = 0$، $\mathscr{R} = 1$، و برای $\varepsilon > V_0$ داشته باشیم $\mathscr{T} = 1$، $\mathscr{R} = 0$. در موردی که $\varepsilon < V_0$ باشد، (۴ـ۱۰ ب)، ملاحظه می‌کنیم که در حد $\hbar \to 0$ داریم $\sinh Ka \to \infty$ و در واقع به‌نتیجه کلاسیکی می‌رسیم. اما برای $\varepsilon > V_0$ (۴ـ۱۰ الف)، در موقع گرفتن حد با مشکلاتی مواجه می‌شویم. این مشکلات به‌ناپیوستگی غیرفیزیکی پتانسیل در $x = 0$ و $x = a$ مربوط می‌شود و عموماً برای یک سد "ملایم" وجود ندارد.

یا ، به‌بیان دیگر ،که داشته باشیم

$$a = \tfrac{1}{2}n\lambda$$

یعنی ، وقتی که پهنای سد مضربی از نصف طول موج دوبروی در داخل سد است . این یک اثر تداخلی مکانیک کوانتومی است . بعدا" خواهیم دید که با الکترونهائی که توسط اتمهای گازهای اصیل در سه‌بعد پراکنده می‌شوند پدیده مشابهی رخ خواهد داد . شفاف بودن پراکننده‌های اتمی برای بعضی از انرژیهای فرودی به‌اثر رامسور[1] موسوم است .



شکل (۴—۴) . انرژیهای تشدیدی ε_n در ضریب عبور . توجه کنیم که وقتی $\varepsilon \to \infty$ ، $\mathcal{T} \to 1$ (حد کلاسیکی)

سدی که در بالا بررسی شد دارای طبیعت دافعه($V_0 > 0$)است وفقط حالتهای پراکندگی را می‌دهد . سد جاذبه یا چاه ($V_0 < 0$) نیز می‌تواند برای $\varepsilon > 0$ حالتهای پراکندگی را بدهد .ضرایب عبور با روشی شبیه به‌روش مورداستفاده در سد دافعه به‌دست می‌آیند .برای انرژیهای منفی ($\varepsilon < 0$) ، در بخش ۹ خواهیم دید که فقط حالتهای مقید درداخل چاه وجود دارند . برای این حالتها باید بخواهیم که ψ در $x = \pm\infty$ صفر شود .

1- Ramsauer

۵ ــ حالتهای مانای مقید در یک بعد

در مسائل حالت مقید ، با پیداکردن ویژه تابعها و انرژیهای مجاز یک هامیلتونی سروکار داریم . اکنون آن جوابهائی از معادله شرودینگر

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right\}\psi_i(x)=\varepsilon_i\psi_i(x) \qquad (۱۱-۴)$$

را جستجو می‌کنیم که تابع شرط مرزی $\psi_i \xrightarrow[x\to\pm\infty]{} 0$ باشند . خواهیم دید که اگر ε_i رادلخواه انتخاب‌کنیم جواب (۴ــ۱۱) ، وقتی به‌بینهایت نزدیک می‌شویم ، به‌سمت صفر میل نخواهد کرد . فقط برای بعضی انتخابهای $\varepsilon=\varepsilon_i$ جوابهای قابل قبولی وجود دارد . این مطلب در واقع بیان می‌کند که‌چگونه طبیعت مقیدبودن ویژه تابعها منجر به‌طیفی‌گسسته می‌شود . وقتی که مجموعه قابل قبول ε_i و ψ_i به‌دست آمد ،مقادیرقابل انتظار عملگرهای متناظر بامشاهده پذیرهای مختلف می‌توانند محاسبه شوند .

در مناسبتهای متعددی نشان خواهیم داد که طبیعت عمومی ویژه حالتهای انرژی می‌توانند از تحلیل مشخصات هامیلتونی متناظر (به‌عنوان مثال ، ویژگیهای تقارنی آن) پیش‌بینی شوند . مسئله را با اثبات قضیه زیر در رابطه با تبهگنی‌هامیلتونیهای یک بعدی شروع می‌کنیم .

قضیه ۹ ــ *حالتهای مقید یک هامیلتونی یک بعدی همیشه ناتبهگن‌اند**.

اثبات (خلف)ــ فرض کنیم ψ_i و ψ_j دو ویژه جواب معادله شرودینگر باشند که تبهگن بوده و به‌طور خطی از یکدیگر مستقل‌اند ، یعنی

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right\}\psi_i(x)=\varepsilon_i\psi_i(x)$$

و

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right\}\psi_j(x)=\varepsilon_j\psi_j(x)$$

---

* این قضیه نمی‌تواند به‌سد بعد تعمیم داده شود . بعلاوه پتانسیلهای یک‌بعدی تکین غیر فیزیکی‌ای (به‌عنوان مثال $V=-1/|x|$) وجود دارند که دارای حالتهای مقید می‌باشندولی تبهگن‌اند . این پتانسیلها در اینجا مورد بحث قرار نخواهند گرفت .

با $\varepsilon_j = \varepsilon_i = \varepsilon$. با ضرب معادله اول در ψ_j و معادله دوم در ψ_i و کم‌کردن آنها ازیکدیگر، خواهیم داشت

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\psi_i\psi_j'' - \psi_j\psi_i'') \quad = 0$$

یا

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d}{dx}(\psi_i\psi_j' - \psi_j\psi_i') = 0$$

که از آن نتیجه‌می‌شود*

$$(\psi_i\psi_j' - \psi_j\psi_i') = \text{const} \qquad (۱۲-۴)$$

چون ،همان‌طورکه برای حالتهای مقید لازم است ، داریم $\psi_j(\infty) = \psi_i(\infty) = 0$ ، نتیجه می‌شود که ثابت فوق صفر است و برای تمام x ها خواهیم داشت

$$\psi_i\psi_j' - \psi_j\psi_i' = 0 \qquad (۱۳-۴)$$

معادله (۴-۱۳) می‌تواند به‌صورت زیر حل شود

$$\frac{\psi_j'}{\psi_j} = \frac{\psi_i'}{\psi_i}, \qquad \frac{d\psi_j}{\psi_j} = \frac{d\psi_i}{\psi_i},$$
$$\ln\psi_j = \ln\psi_i + \ln C, \qquad \psi_j = C\psi_i \qquad (۱۴-۴)$$

اما چون ψ_i و ψ_j هردوبهنجارشده فرض شده‌اند نتیجه می‌شود که باید C را برابر با یک‌قرار دهیم و ψ_i و ψ_j در واقع یکسان‌اند ، و بدین ترتیب قضیه با روش خلف اثبات می‌شود .

---

* کمیت

$$W = \psi_i\psi_j' - \psi_j\psi_i' = \begin{vmatrix} \psi_i & \psi_j \\ \psi_i' & \psi_j' \end{vmatrix}$$

رنسکین[2] تابعهای ψ_j و ψ_i نامیده می‌شود .

2- Wronskian

در واقع ، می‌توانستیم در اثبات قضیه ۹ ، ψ_j را به‌وسیله ψ_i^* جایگزین کنیم و نتیجه بگیریم که $\psi_i^* = \psi_i$ ، که ثابت می‌کند ویژه تابعهای مقید یک هامیلتونی یک بعدی نیز علی‌الاصول حقیقی‌اند .

از قضیه ۲ درفصل ۳ نتیجه می‌شودکه ویژه‌تابعهای مقید یکتا هستند و دوبه‌دومتعامداند یعنی

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_j^*(x)\psi_i(x)\, dx = \delta_{ji}$$

۶ ــ چاه نامتناهی

یک چاه نامتناهی به‌وسیله یک پتانسیل $V(x)$ ، که برای $0 \leqslant x \leqslant a$ داشته باشیم $V(x) = 0$ و برای جاهای دیگر $V(x) = \infty$ ، توصیف می‌شود (شکل ۴ــ۵) .هامیلتونی یک ذره در این چاه عبارت است از $\mathscr{H} = (p^2/2m) + V(x)$.از نظر کلاسیکی ، حرکت در اثر بازتابهای متوالی از دیواره‌های چاه ، در داخل چاه باقی می‌ماند . عملگر هامیلتونی‌متناظر فقط حالتهای مقید را دارا می‌باشد و دارای یک طیف گسسته است . چون V برای $x > a$ و $x < 0$ بینهایت‌است ،خواهیم خواست‌که ψ_n در همه‌جا در خارج از چاه صفر باشد . بنابراین باید فقط جواب داخلی ψ_n را که در رابطه

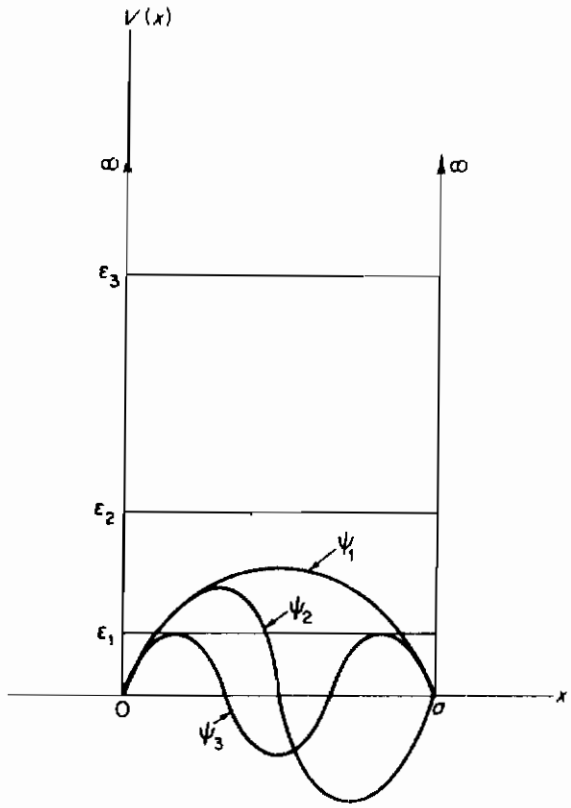
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_n = \varepsilon_n \psi_n$$

صدق می‌کند و در روی مرزها صفر می‌شود ، $\psi_n(0) = \psi_n(a) = 0$ ، پیدا کنیم .جواب‌عمومی عبارت است از

$$\psi_n = A_n \sin k_n x + B_n \cos k_n x \qquad \left(k_n = \left(\frac{2m\varepsilon_n}{\hbar^2}\right)^{1/2}\right)$$

با اعمال شرط پیوستگی در مبداء ، یعنی ، $\psi_n(0) = 0$ ، نتیجه می‌گیریم $B_n = 0$. در $x = a$ باید داشته باشیم $\psi_n(a) = 0$ که نتیجه می‌گیریم

$$\psi_n(a) = A_n \sin k_n a = 0 \qquad (۱۵ - ۴)$$



شکل (۴ــ۵) . چاه بینهایت و چند ویژه مقدار و ویژه تابع آن

معادله (۴ــ۱۵) فقط در صورتی می‌تواند حل (غیربدیهی ، $A_n \neq 0$) شود که شناسه تابع سینوسی محدود به‌مقادیر

$$k_n a = n\pi \qquad (n = 1, 2, 3, \ldots)$$

یا

$$k_n = \frac{n\pi}{a} \qquad (۱۶ - ۴)$$

باشد . این مقادیر ویژه تابعهایی به‌شکل $\psi_n = A_n \sin (n\pi/a)x$ ایجاد می‌کنند . ضرایب توسط شرط بهنجارش زیر تعیین خواهند شد*

$$\int \psi_n^* \psi_n \, dx = |A_n|^2 \int_0^a dx \sin^2\left(\frac{n\pi}{a} x\right) = |A_n|^2 \frac{1}{2} a = 1$$

---

* ثابت بهنجارش همواره حقیقی و مثبت در نظر گرفته خواهد شد .

یا $A_n = (2/a)^{1/2}$.ویژه تابعهای وابسته به‌چاه اکنون به‌شکل زیراند*

$$\psi_n = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \sin \frac{n\pi}{a} x \qquad (0 \leqslant x \leqslant a)$$
$$\psi_n = 0 \qquad \text{(در جاهای دیگر)} \qquad (۱۷-۴)$$

و ویژه مقدارهای آن، با توجه به (۴-۱۶)، به‌صورت

$$\varepsilon_n = \frac{\hbar^2 k_n{}^2}{2m} = \left(\frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}\right) n^2 \qquad (۱۸-۴)$$

در می‌آیند. چندویژه تابع و ویژه مقدار اول در شکل (۴-۱۵) رسم شده‌اند. خاطرنشان کنیم که این ویژه تابعها، همان‌طور که انتظار می‌رفت، حقیقی و ناتبهگن‌اند. یک محاسبه ساده نشان می‌دهد که این توابع دو به‌دو متعامداند. جالب توجه است‌که انرژی حالت‌پایه $(n = 1)$صفرنیست. بعداً خواهیم دید که این پدیده یک نتیجه مستقیم از اصل عدم‌قطعیت است.

یک محاسبه نشان می‌دهد که مقدار قابل انتظار $\hat{p}$ در حالت پایه برابر است با

$$\langle p \rangle_1 = \langle \varepsilon_1 | \hat{p} | \varepsilon_1 \rangle = \int_0^a \psi_1{}^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi_1(x)\, dx$$
$$= \frac{\hbar}{i} \frac{2}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{\pi}{a} x\right) \cos\left(\frac{\pi}{a} x\right) dx = 0$$

مع‌الوصف، چون $\hat{p}^2 = 2m\mathscr{H}$ (در داخل چاه)، داریم

$$\langle p^2 \rangle_1 = 2m \langle \mathscr{H} \rangle_1 = 2m\varepsilon_1$$

لذا، عدم قطعیت در حالت پایه خواهد شد

$$\Delta p_1 = [\langle p^2 \rangle_1 - \langle p \rangle_1{}^2]^{1/2} = (\langle p^2 \rangle_1)^{1/2} = (2m\varepsilon_1)^{1/2} = \frac{\hbar\pi}{a} \qquad (۱۹-۴)$$

---

* توجه کنید که مشتق ψ_n در $x = 0$ و $x = a$ پیوسته نیست، این امر به‌ناپیوستگی بینهایت $V(x)$ در این نقاط نسبت داده می‌شود. به‌پانوشت صفحه ۹۷ رجوع کنید.

توجه‌کنیم که ، هرچه پهنای چاه ، که ذره در آن جایگزیده است ، کاهش یابد ، عدم قطعیت β ، همان‌طور که از اصل عدم قطعیت بر می‌آید ، افزایش می‌یابد . اما چون Δp_1 نمی‌تواند (برای مقدار متناهی a) صفر شود ، (۴ـ۱۹) ایجاب می‌کند که ε_1 نمی‌تواند صفر باشد . در واقع ، تساوی آخر در (۴ـ۱۹) می‌تواند برای محاسبه انرژی حالت پایه یک ذره درداخل چاهی با پهنای a ، بدون توجه به‌شکل مشخص آن ، مورداستفاده قرار گیرد .

استفاده از ویژه تابعها و انرژیهایی که توسط (۴ـ۱۷) و (۴ـ۱۸) داده شده‌اند، ساختن "انتشاردهنده" $G(x, x', t-t_0)$ را ممکن می‌سازد . حرکت یک حالت دلخواه در داخل چاه می‌تواند با استفاده از (۳ـ۹۳) تعیین شود .

۷ ـ چاه متقارن نامتناهی

تقارن‌هامیلتونی اغلب اوقات در ویژه حالتهای آن منعکس است . این نکته‌را باانتقال چاه مذکور دربخش قبل به‌فاصله $a/2$ در جهت منفی محور x نشان می‌دهیم . احساس‌فیزیکی به‌ما می‌گوید که در این انتقال ویژه مقدارهای انرژی دست نخورده باقی می‌مانند .پتانسیل جدید $V(x)$ و ویژه تابعها با استفاده از تبدیل $x \to x + a/2$ به‌دست می‌آیند . پتانسیل (که اینک متقارن است) و ویژه تابعها خواهند شد (شکل ۴ـ۶)

$$V(x) = 0 \text{ ، } -a/2 \leqslant x \leqslant a/2 \quad \text{برای}$$
$$V(x) = \infty \quad \text{در جاهای دیگر}$$

و

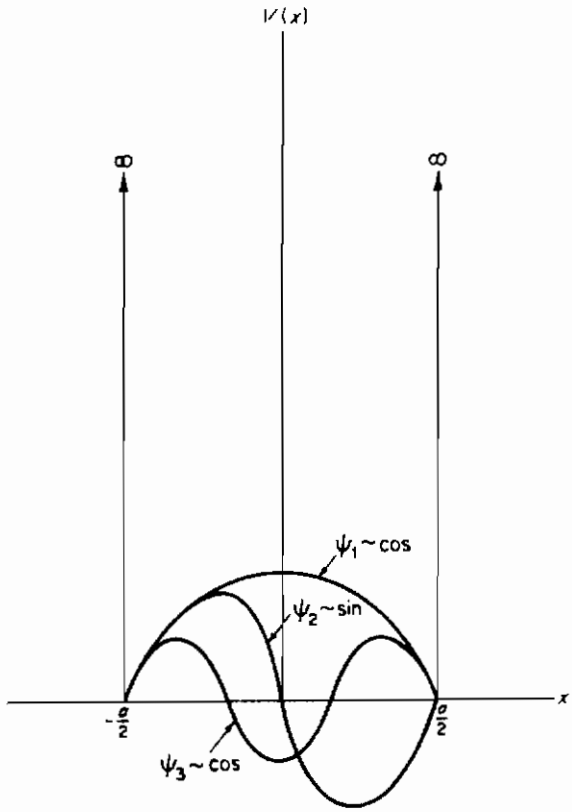
$$\psi_n(x) = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \sin\frac{n\pi}{a}\left(x + \frac{a}{2}\right) = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{n\pi x}{a} + \frac{n\pi}{2}\right)$$

می‌بینیم‌که دومجموعه‌جواب داریم ، یعنی ،

$$\psi_n(x) = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \cos\frac{n\pi}{a}x \qquad (n = 1, 3, 5, \ldots)$$

$$(-a/2 \leqslant x \leqslant a/2)$$

$$\psi_n(x) = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \sin\frac{n\pi}{a}x \qquad (n = 2, 4, 6, \ldots)$$



شکل (۴ـ۶) . چاه متقارن نامتناهی و تقارن و پاد تقارن ویژه‌تابعهـای آن

ویژه تابعهای کسینوسی دارای ویژگی $\psi_n(-x) = \psi_n(x)$ هستند ،یعنی ،نسبت به‌انعکاسهای نسبت به‌مبداء متقارن‌اند . توابع سینوسی دارای ویژگی $\psi_n(-x) = -\psi_n(x)$ می‌باشند و پاد متقارن‌اند . در بخش بعدی خواهیم دید که توابع متقارن و پاد متقارن به‌ترتیب توابـــع با پاریته زوج و با پاریته فرد نامیده می‌شوند . در هردوحالت فرد و زوج ، چگالی $|\psi_n|^2$ یک تابع زوج است .این تقارن انعکاسی تصادفی نیست ، بلکه ، همان‌طور که در زیر نشان‌خواهیم داد ، از خاصیت تقارنی هامیلتونی ناشی می‌شود .

۸ ــ پاریته

عملگر (هرمیتی) پاریته* $\hat{P}$ را که با خاصیت جابه‌جایی

---

* عملگر پاریته یک تابع بندادی از $\hat{p}$ و $\hat{r}$ نیست و لذا مشابه کلاسیکی ندارد . این مثالی از یک عملگر تقارنی است .

$$\hat{P}\mathbf{r} = -\mathbf{r}\hat{P} \qquad (۲۰-۴)$$

یا

$$[\mathbf{r}, \hat{P}]_+ = 0$$

تعریف شده است وارد می‌کنیم ، که در آن *پاد جابه‌جاگر* توسط

$$[\hat{A}, \hat{B}]_+ = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$$

تعریف شده است . معادله (۴ــ۲۰) وقتی $\mathbf{r}$ را به‌وسیله $\mathbf{p}$ جایگزین کنیم (رک مسئله ۴ــ۸) نیزصادق است .از (۴ــ۲۰) نتیجه می‌شود

$$\hat{P}\hat{F}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \hat{F}(-\mathbf{r}, -\mathbf{p})\hat{P}$$

که در آن $\hat{F}$ تابع دلخواهی از $\mathbf{r}$ و $\mathbf{p}$ است . اگر یادآوری شودکه $\hat{F}$ به‌وسیله‌یک‌سری‌تیلور تعریف شده است رابطه اخیر روشن‌تر می‌شود . اگر $\hat{F}$ تابع زوجی از $\mathbf{r}$ و $\mathbf{p}$ باشد داریم $\hat{F}(-\mathbf{r}, -\mathbf{p}) = \hat{F}(\mathbf{r}, \mathbf{p})$. *بنابراین* $\hat{P}$ *با هرتابع زوجی از* $\mathbf{p}$ *و* $\mathbf{r}$ *جابه‌جاپذیراست ،یعنی ،*

$$[\hat{P}, \hat{F}_{\text{even}}(\mathbf{p}, \mathbf{r})] = 0 \qquad (۲۱-۴)$$

با استفاده از خواص جابه‌جاپذیری عملگر پاریته می‌توان تأثیر $\hat{P}$ روی ویژه‌کت $|\mathbf{r}\rangle$ را تعیین کرد . با تأثیردادن $\hat{P}$ روی معادله ویژه‌مقداری $\mathbf{r}|\mathbf{r}\rangle = \mathbf{r}|\mathbf{r}\rangle$ و استفاده‌از(۴ــ۲۰) خواهیم داشت

$$\hat{P}\mathbf{r}|\mathbf{r}\rangle = \mathbf{r}\hat{P}|\mathbf{r}\rangle$$
$$-\mathbf{r}\{\hat{P}|\mathbf{r}\rangle\} = \mathbf{r}\{\hat{P}|\mathbf{r}\rangle\}$$

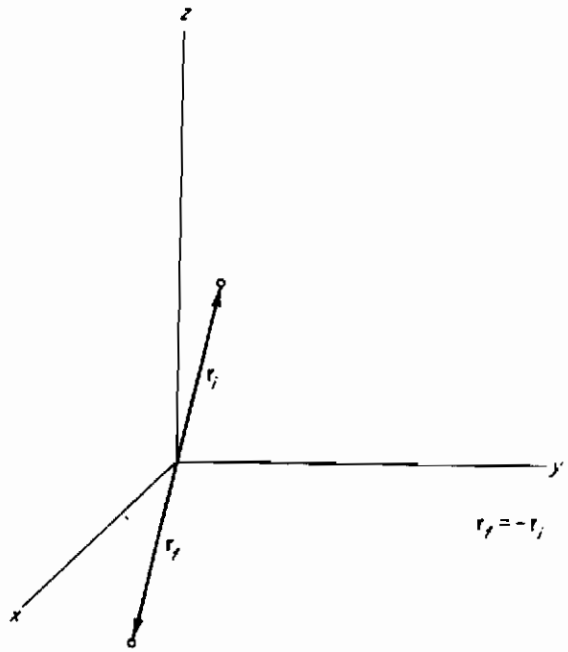
یا

$$\mathbf{r}\{\hat{P}|\mathbf{r}\rangle\} = -\mathbf{r}\{\hat{P}|\mathbf{r}\rangle\} \qquad (۲۲-۴)$$

بردار داخل پرانتزها یک ویـژه کت $\mathbf{r}$ با ویژه مقـدار $-\mathbf{r}$ است،بدین‌ترتیب می‌توانیـم اتحاد زیر را بسازیم

$$\hat{P}|\mathbf{r}\rangle = |-\mathbf{r}\rangle \qquad (۲۳-۴)$$

بنابراین تأثیر عملگر پاریته ایجاد حالتی است که در آن ذره نسبت به‌مبداء منعکس‌شده باشد (شکل ۴–۷).



شکل (۴–۷). اثر انعکاسی عملگر پاریته روی ذره‌ای که در ابتدا در r_i قرار داشته است.

با دوبار تأثیردادن $\hat{P}$ روی $|r\rangle$ ، و با توجه به‌این‌که دو انعکاس متوالی معادل با یک عمل همانی است، می‌توان نوشت

$$\hat{P}\hat{P}|r\rangle = \hat{P}^2|r\rangle = |r\rangle$$

در نتیجه*

$$\hat{P}^2 = \hat{P}\hat{P} = \hat{1} \qquad (۲۴-۴)$$

از (۴ – ۲۴) می‌توان نتیجه گرفت (رک مسئله ۴–۱۴) که ویژه‌مقدارهای $\hat{P}$ عبارتنداز ± 1 . آن ویژه حالتهای $\hat{P}$ که وابسته به‌ویژه‌مقدار ۱+ هستند حالتهای با پاریته زوج می‌باشند. ویژه مقدار ۱– متناظر با حالتهای با پاریته فرد است. از نظر ریاضی می‌توان نوشت

$$\hat{P}|\beta(\text{even})\rangle = +1|\beta(\text{even})\rangle$$

---

* توجه‌کنیم که $\hat{P}$ هم هرمیتی است و هم یکانی‌زیرا $\hat{P} = \hat{P}^\dagger$ و $\hat{P}\hat{P} = \hat{P}^\dagger\hat{P} = \hat{1}$

و

$$\hat{P}|\beta(\text{odd})\rangle = -1|\beta(\text{odd})\rangle \qquad (۲۵-۴)$$

چون هامیلتونی‌ای که در اثر انعکاس تغییرناپذیر باشد* $(\mathscr{H}(-\mathbf{r}) = \mathscr{H}(\mathbf{r}))$ با عملگرپاریته، $\hat{P}$ ، جابه‌جاپذیر است نتیجه می‌شود که دو عملگر باید دارای حداقل یک مجموعه ویژه بردارهای مشترک باشند . می‌توان نتیجه گرفت‌که هر پتانسیل متقارنی دارای حداقل یک مجموعه ویژه‌حالتهائی است که پاریته معینی دارند ، یعنی ، فرد یا زوج‌اند .

ویژه تابع یک حالت با پاریته زوج دارای ویژگی زیر است

$$\begin{aligned}\psi_{\beta_{\text{even}}}(\mathbf{r}) &= \langle\mathbf{r}|\beta\,(\text{even})\rangle = \langle\mathbf{r}|\{\hat{P}|\beta\,(\text{even})\rangle\}\\ &= \{\langle\mathbf{r}|\hat{P}\}|\beta\,(\text{even})\rangle\\ &= \langle-\mathbf{r}|\beta\,(\text{even})\rangle = \psi_{\beta_{\text{even}}}(-\mathbf{r})\end{aligned} \qquad (۲۶-۴)$$

یعنی ، در اثر انعکاس نسبت به‌مبداء تغییرناپذیر است . به‌طریق مشابهی می‌توان نشان‌داد که برای حالتهای با پاریته فرد داریم

$$\psi_{\beta_{\text{odd}}}(\mathbf{r}) = -\psi_{\beta_{\text{odd}}}(-\mathbf{r}) \qquad (۲۷-۴)$$

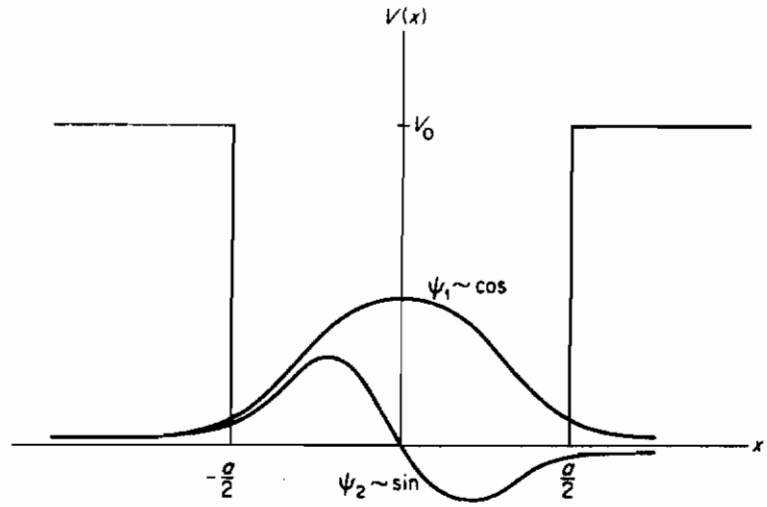
چون ویژه‌حالتهای مقید یک بعدی ناتبهگن و بنابراین یکتا هستند ، نتیجه می‌شود که حالتهائی که متعلق به یک هامیلتونی متقارن هستند لزوماً پاریته معینی دارند ؛ زوج یا فرداند .

۹ ــ چاه متقارن متناهی

برای نشان‌دادن اینکه‌چگونه تقارن برای ساده‌کردن مسئله مورد استفاده قرار می‌گیرد، ذره‌ای را که در یک چاه متقارن متناهی ، $V(x) = 0$ برای $-a/2 \leqslant x \leqslant a/2$ و $V(x) = V_0$ در جاهای دیگر (شکل ۴ــ۸) ، مقید است در نظر می‌گیریم .

---

* چون فرض می‌کنیم هامیلتونی به‌صورت $\mathscr{H} = (\hat{p}^2/2m) + \hat{V}(\mathbf{r})$ است ، $\mathscr{H}$ خودبخود نسبت به جایگزینی $\hat{p}$ به‌وسیله $-\hat{p}$ تغییرناپذیر است . به‌عبارت دیگرانرژی جنبشی همیشه‌با عملگر پاریته جابه‌جاپذیر است .



شکل (۴–۸) . چاه متقارن متناهی و تعدادی از ویژه تابعهـــای آن

بحث خود را به‌حالتهای مقیدی که برای آنها $\varepsilon < V_0$ است محدود می‌کنیم . معـادلـه شرودینگر دارای جوابهای عمومی زیر است

$$\begin{aligned} \psi_n^{\mathrm{I}}(x) &= C_n e^{K_n x} + E_n e^{-K_n x} && (x < -a/2) \\ \psi_n^{\mathrm{II}}(x) &= A_n \sin k_n x + B \cos k_n x && (-a/2 \leqslant x \leqslant a/2) \\ \psi_n^{\mathrm{III}}(x) &= D_n e^{-K_n x} + F_n e^{K_n x}. && (a/2 < x) \end{aligned} \qquad (۲۸-۴)$$

که در آنها

$$k_n = \left(\frac{2m\varepsilon_n}{\hbar^2}\right)^{1/2} \qquad \text{و} \qquad K_n = \left(\frac{2m(V_0 - \varepsilon_n)}{\hbar^2}\right)^{1/2} \qquad (۲۹-۴)$$

چون حالتهای مقید ایجاب می‌کنند که $\psi_n(\pm\infty) = 0$ ، باید در جوابهـای خارجی قـرار دهیم $E_n = F_n = 0$. سپس، خاطرنشان می‌کنیم که ویژه تابعهای مقیدیک هامیلتونـی متقارن یک بعدی باید یا دارای پاریته فرد (پاد متقارن)باشند یا دارای پاریته‌زوج(متقارن). توابع زوج را می‌توان ،با توجه به‌اینکه رابطه $\psi_n(-x) = \psi_n(x)$ در صورتی برقرار اسـت کـه داشته باشیم $A_n = 0$ و $C_n = D_n$ ، ایجاد کرد . بهتر است که به‌این حالتها اعدادکوانتومـی فرد را نسبت دهیم ، دلیل این کار به‌زودی روشن خواهد شد . بنابراین ویژه تابعهای زوج دارای شکل زیراند

$$\begin{aligned}\psi_n^{\mathrm{I}} &= D_n e^{K_n x}\\ \psi_n^{\mathrm{II}} &= B_n \cos k_n x \qquad (n = 1, 3, 5, \ldots;\ \text{پاریته زوج})\\ \psi_n^{\mathrm{III}} &= D_n e^{-K_n x}\end{aligned} \qquad (\text{۴–۳۰ الف})$$

با نسبت‌دادن اعداد زوج به توابع فرد و با توجه به‌اینکه $\psi_n(-x) = -\psi_n(x)$ ایجاب می‌کند که $B_n = 0$ و $C_n = -D_n$ باشد ، خواهیم داشت

$$\begin{aligned}\psi_n^{\mathrm{I}} &= C_n e^{K_n x}\\ \psi_n^{\mathrm{II}} &= A_n \sin k_n x \qquad (n = 2, 4, 6, \ldots;\ \text{پاریته فرد})\\ \psi_n^{\mathrm{III}} &= -C_n e^{-K_n x}\end{aligned} \qquad (\text{۴–۳۰ ب})$$

برای هرحالت پاریته ، می‌خواهیم که ویژه تابع و مشتق آن در $x = \pm a/2$ پیوسته باشد . به‌علت تقارن ψ_n ، پیوستگی در $x = +a/2$ خود به‌خود پیوستگی در $x = -a/2$ را تأمین می‌کند . شرایط لازم برای پیوستگی در $x = a/2$ در جدول (۴–۲) خلاصه شده‌اند. با تقسیم (ب) بر (الف) در جدول (۴–۲) ، روابط زیر را به‌دست می‌آوریم

$$k_n \tan \tfrac{1}{2} k_n a = K_n \qquad (\text{۴–۳۱ الف})$$

$$k_n \cot \tfrac{1}{2} k_n a = -K_n \qquad (\text{۴–۳۱ ب})$$

به‌علاوه ، می‌توان از (الف) برای بیان C_n یا D_n برحسب B_n یا A_n استفاده کرد . در این صورت ویژه تابعها به‌صورت زیر در خواهند آمد

$$\begin{aligned}\psi_n^{\mathrm{I}} &= B_n(e^{K_n a/2} \cos \tfrac{1}{2} k_n a) e^{K_n x}\\ \psi_n^{\mathrm{II}} &= B_n \cos k_n x \qquad (n = 1, 3, 5, \ldots;\ \text{پاریته زوج})\\ \psi_n^{\mathrm{III}} &= B_n(e^{K_n a/2} \cos \tfrac{1}{2} k_n a) e^{-K_n x}\end{aligned} \qquad (\text{۴–۳۲ الف})$$

و

$$\begin{aligned}\psi_n^{\mathrm{I}} &= -A_n(e^{K_n a/2} \sin \tfrac{1}{2} k_n a) e^{K_n x}\\ \psi_n^{\mathrm{II}} &= A_n \sin k_n x \qquad (n = 2, 4, 6, \ldots;\ \text{پاریته فرد})\\ \psi_n^{\mathrm{III}} &= A_n(e^{K_n a/2} \sin \tfrac{1}{2} k_n a) e^{-K_n x}\end{aligned} \qquad (\text{۴–۳۲ ب})$$

جدول (۴–۲)

پاریته فرد		پاریته زوج	
a.	$\psi_n^{II}(a/2) = \psi_n^{III}(a/2)$ $A_n \sin \frac{1}{2}k_n a = D_n e^{-K_n a/2}$	a.	$\psi_n^{II}(a/2) = \psi_n^{III}(a/2)$ $B_n \cos \frac{1}{2}k_n a = C_n e^{-K_n a/2}$
b.	$\psi_n'^{II}(a/2) = \psi_n'^{III}(a/2)$ $k_n A_n \cos \frac{1}{2}k_n a = -K_n D_n e^{-K_n a/2}$	b.	$\psi_n'^{II}(a/2) = \psi_n'^{III}(a/2)$ $-k_n B_n \sin \frac{1}{2}k_n a = -K_n C_n e^{-K_n a/2}$

ضرایب A_n و B_n به‌وسیله شرایط بهنجارش تعیین می‌شوند . وقتی ε_n (K_n و k_n) تعیین‌شد، ویژه‌تابعها به‌طور یکتائی به‌دست خواهند آمد . این ویژه مقدارهای انرژی از (۴–۳۱ الف) و (۴–۳۱ ب) به‌دست می‌آیند . چون این معادلات غیرجبری هستند ، بهترین روش برای حل آنها روش ترسیمی است . قرار می‌دهیم

$$R = \left(\frac{mV_0 a^2}{2\hbar^2}\right)^{1/2} \qquad \text{و} \qquad \xi_n = \left(\frac{m\varepsilon_n a^2}{2\hbar^2}\right)^{1/2} \qquad (۳۳-۴)$$

(۴–۳۱ الف) و (۴– ۳۱ ب) برحسب آنها خواهند شد

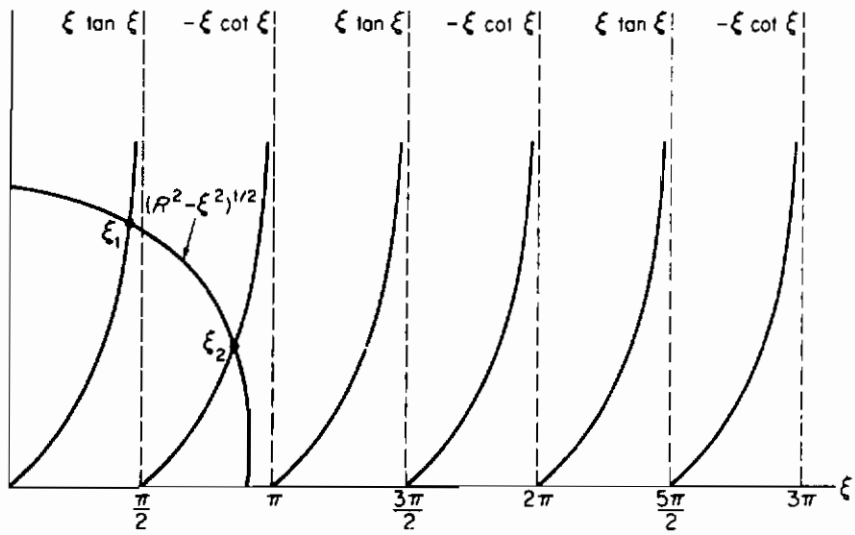
$$\xi_n \tan \xi_n = (R^2 - \xi_n^2)^{1/2} \qquad \text{و} \qquad -\xi_n \cot \xi_n = (R^2 - \xi_n^2)^{1/2}$$

جوابهای ξ_n ویژه مقدارهای انرژی ε_n در (۴–۳۳) را به‌دست می‌دهند و خودشان به‌وسیله نقاط تقاطع تابع دایره‌ای $(R^2 - \xi^2)^{1/2}$ با توابع مثلثاتی $\xi \tan \xi$ و $\xi \cot \xi$ (شکل ۴–۹) به‌دست می‌آیند .

بنابراین می‌توانیم ویژه تابعها را با تناوب حالتهای با پاریته زوج و فرد ، یعنی ، $n = ۱، ۲، ۳، ...$ برای حالتهای با پاریته زوج و $n = ۲، ۴، ۶، ...$ برای حالتهای با پاریته فرد ، مرتب کنیم . ملاحظه می‌کنیم که اولین جواب ξ_1 (پاریته زوج) متناظر است با حالت پایه ، در حالی که دومین جواب ξ_2 (پاریته فرد) متعلق است به‌اولین حالت برانگیخته ، و سومین جواب ξ_3 باز هم متعلق است به‌پاریته زوج ، و الی آخر .

هرچه چاه عمیق‌تر ، یعنی ، V_0 بزرگتر باشد ، شعاع R تابع دایره‌ای بزرگتر است ، و بنابراین نقاط تقاطع زیادتری با توابع مثلثاتی داریم ، و در نتیجه ، حالتهای مقیدزیادتری خواهیم داشت . از شکل (۴–۹) می‌توان نشان داد که همیشه حداقل یک نقطه تقاطع وجود دارد ، به‌طوری که حتی در تنگترین چاهها حداقل یک حالت مقید وجود دارد ، و پاریته‌آن

زوج است .



شکل (۴ـ۹) . حل ترسیمی برای ویژه‌مقدارهای یک چاه متقارن‌متناهی

بالاخره ، با در نظرگرفتن حد $V_0 \to \infty$ ، ارتباط آنرا با چاه بینهایت تحقیق می‌کنیم از (۴ـ۲۹) نتیجه می‌شود که $K_n \to \infty$ و جوابهای خارجی در (۴ـ۳۰) در حقیقت‌هم برای حالتهای زوج و هم برای حالتهای فرد صفر می‌شوند . به‌علاوه ، شعاع تابع دایره‌ای (شکل ۴ـ۹) به‌سمت بینهایت میل می‌کند ، و توابع $\xi \tan \xi$ و $-\xi \cot \xi$ را در نقاط مجانبی $\xi_n = \frac{1}{2}n\pi$ قطع می‌کند . ویژه مقدارها ، از (۴ـ۳۳) ، به‌صورت

$$\frac{m\varepsilon_n a^2}{2\hbar^2} = \xi_n{}^2 = \frac{1}{4}n^2\pi^2$$

یا

$$\varepsilon_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}n^2$$

به‌دست می‌آیند . این نتیجه با نتایج قبلی برای ویژه مقدارهای انرژی یک چاه بینهایت مطابقت می‌کند .

۱۰ ـ نوسانگر هماهنگ

مکانیک کوانتومی یک ذره که به‌وسیله یک پتانسیل کشسان $\frac{1}{2}kx^2$ به‌طرف مرکزکشیده

می‌شود هم‌دارای اهمیت عملی و هم دارای اهمیت آموزشی است . در مسائل فیزیکی‌که تابش الکترومغناطیسی ، ارتعاشات شبکه‌ای در جامدات ، و ارتعاشات مولکولی را در بر دارند ، حرکات می‌توانند به‌نوسانات ساده یک‌بعدی تجزیه شوند . نخست ویژه مقدارها و ویژه‌تابعها را در مکانیک موجی شرودینگر به‌دست می‌آوریم ، سپس ثابت می‌کنیم که این جوابها می‌توانستند با استفاده از صورتبندی عملگری به‌دست آیند .

معادله شرودینگر برای نوسانگر عبارت است از

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right\}\psi_n=\varepsilon_n\psi_n \qquad (۳۴-۴)$$

که در آن $\omega^2 = k/m$. همان‌طور که قبلا"ثابت کردیم ، این هامیلتونی متقارن فقط حالتهای مقید را تأمین می‌کند و بنابراین دارای یک طیف گسسته است . ویژه تابعها نیز حقیقی ، ناتبهگن ، یکتا ،متقابلا" متعامد ، و با پاریته معین می‌باشند .

با واردکردن متغیر بدون بعد $\xi = \sqrt{\alpha}\,x$ ، که در آن $\alpha = m\omega/\hbar$ است ،(۴-۳۴)خواهد شد

$$\frac{d^2\psi_n(\xi)}{d\xi^2}+\left(\frac{\lambda_n}{\alpha}-\xi^2\right)\psi_n(\xi)=0 \qquad (۳۵-۴)$$

با $\lambda_n = 2m\varepsilon_n/\hbar^2$. فقط آن جوابهائی که در شرط $\psi_n(\pm\infty)=0$ صدق‌کنند قابل‌قبول‌اند . خواهیم دید که اگر ε را به‌دلخواه انتخاب کنیم ، جواب (۴-۳۵) معمولا" دربینهایت واگرا می‌شود . بنابراین ، ویژه‌مقدارهای انرژی برای مسئله ،آنهائی هستند که‌برای آنها (۴-۳۵) دارای جوابهائی باشد که در بینهایت صفر شوند .

روش حل (۴-۳۵) بر نظریه متعارف معادلات دیفرانسیل ،که برای دانشجویان ریاضی شناخته شده است ، پایه‌گذاری شده است . ما با این فرض شروع می‌کنیم که جوابی به‌شکل

$$\psi = G(\xi)H(\xi) \qquad (۳۶-۴)$$

وجود دارد که در آن $G(\xi)$ تابعی است که رفتار ψ را برای مقادیر بزرگ $|\xi|$ تشریح می‌کند و $H(\xi)$ یک سری بینهایت است . تابع $G(\xi)$ جواب مجانبی نامیده می‌شود و می‌توانند با بررسی رفتارمعادله دیفرانسیل درفاصلهٔ بسیار دوراز مبداء به‌دست‌آید.برای‌مقدار مجانبی ξ ($|\xi|\to\infty$) می‌توان قرار داد $\xi^2 \gg \lambda_n/\alpha$ و (۴-۳۵) را به‌صورت

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} - \xi^2\psi \simeq 0$$

نوشت که دوجواب مجانبی آن که به‌طور خطی از یکدیگر مستقل‌اند عبارتنداز $e^{\xi^2/2}$ و $e^{-\xi^2/2}$. جواب اول در بینهایت واگرا می‌شود و منجر به‌ویژه تابعهائی می‌شود که برای حالتهای‌مقید غیرقابل قبول‌اند .معادله (۴ـ۳۶) پیشنهاد می‌کند که یک جواب آزمایشی به‌شکل $\psi = e^{-\xi^2/2}H(\xi)$ به‌کار ببریم ،که در آن صورت (۴ـ۳۵) خواهد شد

$$\frac{d^2H(\xi)}{d\xi^2} - 2\xi\frac{dH(\xi)}{d\xi} + \left(\frac{\lambda_n}{\alpha} - 1\right)H(\xi) = 0 \qquad (۳۷-۴)$$

معادله (۴ـ۳۷) معادله دیفرانسیل‌هرمیت است . بنا به‌فرض، $H(\xi)$ باید بتواند به‌صورت‌یک سری بینهایت به‌شکل

$$H = \sum_{j=0}^{\infty} a_j \xi^j \qquad (۳۸-۴)$$

بیان شود . با قراردادن (۴ـ۳۸) در معادله هرمیت و مشتق‌گیری از هرجمله سری ، خواهیم داشت

$$\sum_{j=2}^{\infty} j(j-1)a_j\xi^{j-2} - 2\xi\sum_{j=1}^{\infty} ja_j\xi^{j-1} + \left(\frac{\lambda_n}{\alpha} - 1\right)\sum_{j=0}^{\infty} a_j\xi^j = 0$$

یا ، با مجتمع‌کردن توانهای یکسان ξ^j ،

$$\sum_{j=0}^{\infty}\left\{(j+1)(j+2)a_{j+2} + \left[\frac{\lambda_n}{\alpha} - (1+2j)\right]a_j\right\}\xi^j = 0 \qquad (۳۹-۴)$$

چون (۴ـ۳۹) باید برای تمام مقادیر ξ صادق باشد نتیجه می‌شودکه هرکدام از ضرایب‌باید جداگانه صفر شود ، و بدین ترتیب معادله *بازگشتی دوجمله‌ای* زیر را به‌دست می‌آوریم

$$a_{j+2} = -\left[\frac{(\lambda_n/\alpha) - (1+2j)}{(j+1)(j+2)}\right]a_j \qquad (۴۰-۴)$$

با انتخاب مقدار دلخواهی برای a_0 ، یک جواب برای (۴ـ۳۷) به‌دست می‌آوریم . معادله

(۴ـ۴۰) می‌تواند برای بیان تمام ضرایب زوج متوالی برحسب a_0 مورداستفاده قرار گیرد. به‌عنوان مثال، برای $j=0$ و $j=2$، به‌ترتیب داریم

$$a_2 = -\left[\frac{(\lambda_n/\alpha)-1}{2}\right]a_0$$

و

$$a_4 = \frac{-[(\lambda_n/\alpha)-5]}{12}a_2 = \frac{[(\lambda_n/\alpha)-5]}{12}\frac{[(\lambda_n/\alpha)-1]}{2}a_0$$

به‌این طریق یک سری زوج به‌شکل

$$H^{\text{even}}(\xi) = a_0\left[1 - \frac{((\lambda_n/\alpha)-1)}{2}\xi^2 + \frac{((\lambda_n/\alpha)-5)(\lambda_n/\alpha)-1)}{(12)(2)}\xi^4 - \cdots\right] \qquad (۴۱-۴)$$

ایجاد می‌کنیم. اگر برای a_1 مقدار دلخواهی انتخاب کنیم، جوابی به‌صورت سری فرد

$$H^{\text{odd}}(\xi) = a_1\left[\xi - \frac{((\lambda_n/\alpha)-3)}{6}\xi^3 + \frac{((\lambda_n/\alpha)-3)((\lambda_n/\alpha)-7)}{(6)(20)}\xi^5 - \cdots\right] \qquad (۴۲-۴)$$

به‌دست می‌آوریم. چون a_0 و a_1 دلخواه هستند، و دوسری به‌طور خطی ازیکدیگر مستقل‌اند، جواب عمومی معادله هرمیت به‌شکل $H_{\text{general}}(\xi) = H^{\text{even}}(\xi)$ است. در این صورت جواب معادله شرودینگر (۴ـ۳۵) عبارت است از

$$\psi_{\text{general}}(\xi) = e^{-\xi^2/2}[H_{\text{even}}(\xi) + H_{\text{odd}}(\xi)] \qquad (۴۳-۴)$$

و برای هرمقداری از λ_n/α معتبر است.

متاسفانه، تا اینجا هنوز کوانتش ظاهر نشده است. علت آن این است که (۴ ـ ۴۳) هنوز در شرایط مرزی مطلوب در بینهایت صدق نمی‌کند. درواقع، یک مقایسه آزمایشی‌نشان می‌دهد که برای $|\xi| \gg 1$، هم سری زوج و هم سری فرد حداقل با سرعت تابع e^{ξ^2} به‌سمت بینهایت میل می‌کنند. در نتیجه، برای مقادیر بزرگ ξ داریم

$$\psi = e^{-\xi^2/2}H(\xi) \sim e^{-\xi^2/2}e^{\xi^2} \underset{|\xi|\to\infty}{\to} \infty$$

و نتیجه می‌شود که ψ در بینهایت واگرا است و بنابراین غیرقابل قبول است.

اکنون جواب (۴ــ۳۵) را وقتی که

$$\frac{\lambda_n}{\alpha} = 2n + 1 \qquad (n = 0, 1, 2, \ldots)$$

باشد بررسی می‌کنیم . اگر n زوج باشد ، معادله بازگشتی (۴ــ۴۰) نشان می‌دهد که a_{n+2} و تمام ضرایب بالاتر صفر می‌شوند . در این صورت ، جواب وابسته به n زوج به‌صورت

$$\psi = e^{-\xi^2/2}(H_n(\text{چندجمله‌ای زوج از درجه } n) + H^{\text{odd}}(\text{سری}))$$

در می‌آید . چون دیدیم که سری (فرد) منجر به‌جواب غیرقابل قبولی می‌شود ، فقط چند جمله‌ای (زوج) را نگه می‌داریم (یعنی ، قرار می‌دهیم $a_1 = 0$) . به‌همین طریق اگر n فرد باشد ، فقط جملات فرد را ، که منجر به‌یک چندجمله‌ای (فرد) از درجه n می‌شوند ، نگاه می‌داریم . کاملاً معلوم است که $e^{-\xi^2/2}$ برای مقادیر بزرگ $|\xi|$ به‌هرچندجمله‌ای غلبه می‌کند؛ در نتیجه ، فقط برای وقتی که $\lambda_n/\alpha = 2n + 1$ باشد ویژه‌تابعهای قابل‌قبولی به‌دست خواهیم آورد . با استفاده ازتعریفهای λ_n و α نتیجه می‌گیریم که ویژه‌تابعهای مقید فقط برای انرژیهای

$$\frac{\lambda_n}{\alpha} = \frac{2\varepsilon_n}{\hbar\omega} = 2n + 1$$

یا

$$\varepsilon_n = \hbar\omega(n + \tfrac{1}{2}) \qquad (n = 0, 1, 2, \ldots) \qquad (۴۴ - ۴)$$

وجود دارند . ویژه تابعها به‌شکل

$$\psi_n(\xi) = e^{-\xi^2/2}H_n(\xi) \qquad (۴۵ - ۴)$$

که در آن $H_n(\xi)$ یک چند جمله‌ای زوج یا فرد از درجه n است ، در می‌آیند . چون $e^{-\xi^2/2}$ تابع زوجی است ، زوج یا فردبودن پاریته بستگی به‌مقدار n دارد . ضرایب به‌کمک (۴ــ۴۰) وقتی که a_0 و a_1 مشخص شده باشند ، تعیین می‌شوند . به‌طور قراردادی قرار می‌دهیم

$$a_0^{(n)} = \frac{(-1)^{n/2}n!}{[\frac{1}{2}n]!} \qquad (n \text{ زوج})$$

و

$$a_1^{(n)} = \frac{(-1)^{(n-1)/2}2(n!)}{[\frac{1}{2}(n-1)]!} \quad (n \text{ فرد})$$

که در این حالت ، $H_n(\xi)$ تبدیل به‌چند جمله‌ای هرمیت می‌شود .تعدادی‌از چندجمله‌ایهای اول عبارتنداز

$$\begin{aligned} H_0 &= 1 & H_1 &= 2\xi \\ H_2 &= -2 + 4\xi^2 & H_3 &= -12\xi + 8\xi^3 \\ H_4 &= 12 - 48\xi^2 + 16\xi^4 & H_5 &= 120\xi - 160\xi^3 + 32\xi^5 \end{aligned} \qquad (۴۶-۴)$$

ویژه تابعها برحسب این چندجمله‌ایهای هرمیت به‌شکل

$$\psi_n(\xi) = N_n e^{-\xi^2/2} H_n(\xi)$$

یا

$$\psi_n(x) = N_n e^{-\alpha x^2/2} H_n(\sqrt{\alpha}\, x), \qquad (۴۷-۴ \text{ الف})$$

در می‌آیند ، که در آنها ثابت بهنجارش عبارت است از

$$N_n = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \left(\frac{1}{2^n n!}\right)^{1/2} \qquad (۴۷-۴ \text{ ب})$$

چند ویژه تابع بهنجارشده و ویژه مقدارهای اول نوسانگر عبارتنداز

$$\begin{aligned} \psi_0 &= \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\alpha x^2/2}[1] & (\varepsilon_0 &= \tfrac{1}{2}\hbar\omega) \\ \psi_1 &= \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \sqrt{\frac{1}{2}}\, e^{-\alpha x^2/2}[2\sqrt{\alpha}\, x] & (\varepsilon_1 &= \tfrac{3}{2}\hbar\omega) \\ \psi_2 &= \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \sqrt{\frac{1}{8}}\, e^{-\alpha x^2/2}[4\alpha x^2 - 2] & (\varepsilon_2 &= \tfrac{5}{2}\hbar\omega) \end{aligned} \qquad (۴۸-۴)$$

توجه کنیم که ویژه مقدارهای متوالی به‌طور مساوی به‌وسیله انرژی $\hbar\omega$ از یکدیگرجداشده‌اند. بنابراین ، طبیعت عمومی‌طیف با فرضیه پلانک که در فصل اول موردبحث قرارگرفت مطابقت دارد . در ذیل ثابت خواهیم کرد که وجود یک انرژی نقطه صفر ، $\varepsilon_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ ، که در

نظریه پلانک غایب است ، در اینجا به‌عنوان نتیجه مستقیمی از اصل عدم قطعیت ظاهر می‌شود ، همان‌طور که در مورد چاه پتانسیل ظاهر شد .

۱۱ ــ خواص ویژه تابعهای نوسانگر

محاسبات عناصر ماتریس، با استفاده از خواص چندجمله‌ایهای هرمیت که در زیر آمده‌اند ، آسان می‌شود

$$(۱)\quad e^{\xi^2-(z-\xi)^2}=\sum_{n=0}^{\infty} H_n(\xi)\frac{z^n}{n!} \qquad \text{(تابع مولد)}$$

$$(۲)\quad H_n(\xi)=(-1)^n e^{\xi^2}\frac{a^n}{d\xi^n}(e^{-\xi^2}) \quad \text{(فرمول رودریگز}^{۳}\text{)}$$

$$(۳)\quad H_{n+1}(\xi)-2\xi H_n(\xi)+2nH_{n-1}(\xi)=0 \qquad (۴۹-۴)$$

$$(۴)\quad H_n'(\xi)=2n\,H_{n-1}(\xi)$$

$$(۵)\quad H_n''(\xi)=4n(n-1)H_{n-2}(\xi).$$

به‌عنوان مثال ، عناصر ماتریس $\mathfrak{x}$ می‌توانند به‌صورت

$$\langle\varepsilon_m|\mathfrak{x}|\varepsilon_n\rangle=\int\psi_m^*(x)x\psi_n(x)\,dx$$

$$=\frac{1}{\alpha}\int\psi_m^*(\xi)\xi\psi_n(\xi)\,d\xi \qquad (۵۰-۴)$$

بیان شوند . با ضرب‌کردن دوطرف خاصیت (۳)ی بالا در $e^{-\xi^2/2}$ رابطه زیر را به‌دست می‌آوریم

$$\xi e^{-\xi^2/2}H_n=ne^{-\xi^2/2}H_{n-1}+\frac{1}{2}e^{-\xi^2/2}H_{n+1}$$

$$\xi\frac{\psi_n}{N_n}=n\frac{\psi_{n-1}}{N_{n-1}}+\frac{1}{2}\frac{\psi_{n+1}}{N_{n+1}}$$

یا

$$\xi\psi_n=n\frac{N_n}{N_{n-1}}\psi_{n-1}+\frac{1}{2}\frac{N_n}{N_{n+1}}\psi_{n+1} \qquad (۵۱-۴)$$

3- Rodrigues

با قراردادن (۴–۵۱) در (۴–۵۰) ، عنصر ماتریس خواهد شد

$$\begin{aligned}\langle\varepsilon_m|\hat{x}|\varepsilon_n\rangle &= \frac{N_n}{N_{n-1}}\frac{n}{\alpha}\int\psi_m{}^*\psi_{n-1}\,d\xi + \frac{N_n}{2N_{n+1}\alpha}\int\psi_m{}^*\psi_{n+1}\,d\xi \\ &= \frac{N_n}{N_{n-1}}\frac{n}{\sqrt{\alpha}}\int\psi_m{}^*\psi_{n-1}\,dx + \frac{N_n}{2N_{n+1}\sqrt{\alpha}}\int\psi_m{}^*\psi_{n+1}\,dx \\ &= \frac{N_n}{N_{n-1}}\frac{n}{\sqrt{\alpha}}\delta_{m,n-1} + \frac{N_n}{2N_{n+1}}\frac{1}{\sqrt{\alpha}}\delta_{m,n+1} \qquad (۴-۵۲)\end{aligned}$$

بنابراین تنها عناصر غیرصفر ماتریس عبارتنداز

$$\langle\varepsilon_{n-1}|\hat{x}|\varepsilon_n\rangle = \frac{N_n n}{N_{n-1}\sqrt{\alpha}} = \left(\frac{n}{2\alpha}\right)^{1/2} = \left(\frac{n\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2} \qquad (\text{۴–۵۳ الف})$$

و

$$\langle\varepsilon_{n+1}|\hat{x}|\varepsilon_n\rangle = \frac{N_n}{N_{n+1}}\frac{1}{2\sqrt{\alpha}} = \left(\frac{n+1}{2\alpha}\right)^{1/2} = \left[\frac{(n+1)\hbar}{2m\omega}\right]^{1/2} \qquad (\text{۴–۵۳ ب})$$

عملگر $\hat{x}$ می‌تواند در ویژه پایه $\mathscr{H}$ به‌صورت

$$\hat{x} \to \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2}\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}_{\text{ویژه پایه}\mathscr{H}}$$

نمایش داده شود . از (۴–۵۲) دیده می‌شود که عناصر قطری ماتریس صفراند و داریم $\langle\varepsilon_n|\hat{x}|\varepsilon_n\rangle = 0$ ؛ بنابراین مکان متوسط ذره‌ای که در یک ویژه حالت نوسانگر قرار دارد در مبداءاست . یک محاسبه که خاصیت (۴) فوق را درگیر می‌کند نشان می‌دهد که متوسط تکانه در هرحالت نیز صفر است (ر ک مسئله ۳ – ۸) ، یعنی ، $\langle p\rangle_n = 0$. محاسبه مقادیر قابل انتظار

$\langle x^2\rangle_n$ و $\langle p^2\rangle_n$ بـه‌این سادگیهـــا نیست . از قضیه ویریال* در مکانیک کلاسیکی ،که بیان می‌کند میانگین‌های زمانی $\bar{T}$ و $\bar{V}$ برای یک نوسانگر با یکدیگر برابرند ، استفاده خواهیم کرد . با تعمیم این قضیه به‌مقادیرقابل انتظارکوانتومی ، می‌توانیم برای تمام حالتهای نوسانگرقرار دهیم $\langle T\rangle_n = \langle V\rangle_n$. اما چون $\langle T+V\rangle_n = \langle \mathscr{H}\rangle_n = \varepsilon_n$ ، نتیجه‌می‌شود $\langle T\rangle_n = \langle V\rangle_n = \frac{1}{2}\varepsilon_n$ ، که از آن نتیجه می‌گیریم

$$\langle T\rangle_n = \frac{1}{2m}\langle p^2\rangle_n = \tfrac{1}{2}\varepsilon_n = \tfrac{1}{2}\hbar\omega(n+\tfrac{1}{2})$$

و

$$\langle V\rangle_n = \tfrac{1}{2}m\omega^2\langle x^2\rangle_n = \tfrac{1}{2}\varepsilon_n = \tfrac{1}{2}\hbar\omega(n+\tfrac{1}{2})$$

با استفاده از این نتایج عدم قطعیت متغیرهای بندادی می‌توانند به‌صورت

$$\Delta p_n = [\langle p^2\rangle_n - \langle p\rangle^2{}_n]^{1/2} = [(n+\tfrac{1}{2})\hbar m\omega]^{1/2}$$

و

$$\Delta x_n = [\langle x^2\rangle_n - \langle x\rangle^2{}_n]^{1/2} = [(n+\tfrac{1}{2})\hbar/m\omega]^{1/2}$$

بیان شوند . بنابراین حاصل ضرب عدم قطعیتها در n امین حالت نوسانگر عبارت است از

$$\Delta x_n\,\Delta p_n = (n+\tfrac{1}{2})\hbar \qquad (۵۴-۴)$$

توجه کنیم که در هیچ حالتی‌این حاصل‌ضرب ،همان‌طورکه اصل عدم قطعیت ایجاب‌می‌کند ، کوچکتراز $\frac{1}{2}\hbar$ نخواهد بود ، در واقع حد پائینی در حالت پایه $(n=0)$ حاصل می‌شود . اگـر انرژی نقطه صفر $\frac{1}{2}\hbar\omega$ نبود (۴-۵۴) به‌صورت $\Delta p_n\,\Delta x_n = n\hbar$ در می‌آمد ، که در این صورت اصل عدم قطعیت در حالت پایه نقض می‌شد .

---

* برای بحث در بارهٔ "قضیه‌ویریال" به‌کتاب زیر مراجعه کنید

J. Marion, "Classical Dynamics of Particles" 2nd ed. Academic Press, New York,1970

یا به‌مسائل ۲-۳و۴-۱۰ مراجعه کنید .

۱۲ ـ نوسانات در حالتهای غیرمانا ـ تناظر کلاسیکی

اگر ذره‌ای تحت تاثیر یک نیروی بازگرداننده کشسان قرار داشته باشد و حالت اولیه آن به‌وسیله یک ویژه‌حالت (مانای) $\mathscr{H}$ مشخص شود ، مقادیر قابل انتظار $\hat{p}$ و $\hat{x}$ مانا هستند و در تمام زمانها داریم $\langle p\rangle = 0$ و $\langle x\rangle = 0$. با این وجود اگر حالت اولیه ذره (در $t = t_0 = 0$) یک حالت دلخواه $\Psi(x) \neq \psi_n$ باشد تحول آن به‌وسیلهٔ

$$\Psi(x, t) = \int G(x, x', t)\Psi(x')\, dx' \qquad (۵۵-۴)$$

تعیین می‌شود ، که در آن "انتشاردهنده"*، با توجه به (۳ـ۴۹) ، (۴ـ۴۴) و (۴ـ۴۷) ، عبارت است از

$$\begin{aligned} G(x, x', t) &= \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n^*(x')\psi_n(x) \exp\frac{-i\varepsilon_n t}{\hbar} \\ &= \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/2} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{2^n n!}\right) \exp\left[-\frac{1}{2}\alpha(x^2 + x'^2)\right] H_n(\sqrt{\alpha}\, x) \\ &\quad \cdot H_n(\sqrt{\alpha}\, x') \exp[-i(n + \tfrac{1}{2})\omega t] \end{aligned}$$

به‌علت وجود ضریب نیمه صحیح $(n + \frac{1}{2})$ در توان عامل نوسانی ، نتیجه می‌شود که انتشاردهنده دارای دوره تناوبی است که دوبرابر دوره تناوب کلاسیکی $\tau_{\text{class}} = 2\pi/\omega$ است . در واقع ، بعد از گذشت زمان τ_{class} ، انتشاردهنده و در نتیجه تابع حالت ψ در (۴ـ۵۵) ، یک ضریب اضافی $\exp[i(n + \frac{1}{2})2\pi] = -1$ ایجاد می‌کند ؛ بنابراین ، بعد از یک دوره تناوب کلاسیکی علامت آنها عوض می‌شود . با این وجود ، چون مقادیر قابل انتظار به‌جای انتگرال ψ شامل انتگرال $|\psi|^2$ می‌باشند در واقع مشاهده‌پذیرها با فرکانس طبیعی ω نوسان می‌کنند .

فرکانسهای نوسان $\langle x\rangle$ و $\langle p\rangle$ را می‌توانیم با استفاده از معادلات حرکت (۳ـ۶۱) که عبارتنداز

---

* این انتشاردهنده را می‌توان به‌صورت بستهٔ زیر نیز بیان کرد

$$G(x, x', t) = \left[\frac{m\omega}{2\pi\hbar i \sin\omega t}\right]^{1/2} \exp\left\{\frac{im\omega}{2\hbar \sin\omega t}\,[(x^2 + x'^2)\cos\omega t - 2xx']\right\}$$

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt} = -\frac{\langle[\mathscr{H}, \hat{x}]\rangle}{i\hbar} \qquad \text{و} \qquad \frac{d\langle p\rangle}{dt} = -\frac{\langle[\mathscr{H}, \hat{p}]\rangle}{i\hbar}$$

به‌دست آوریم که در آنها $\mathscr{H} = (\hat{p}^2/2m) + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$. چون $\hat{x}$ با انرژی پتانسیل ، و $\hat{p}$ با انرژی جنبشی ، در $\mathscr{H}$ ، جابه‌جاپذیراند معادلات فوق خواهند شد

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt} = -\frac{1}{2mi\hbar}\langle[\hat{p}^2, \hat{x}]\rangle = -\frac{1}{2mi\hbar}\langle(\hat{p}\hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p}\hat{p})\rangle \qquad (۵۶-۴)$$

و

$$\frac{d\langle p\rangle}{dt} = -\frac{m\omega^2}{2i\hbar}\langle[\hat{x}^2, \hat{p}]\rangle = -\frac{m\omega^2}{2i\hbar}\langle(\hat{x}\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x}\hat{x}) \qquad (۵۷-۴)$$

با دوبار کاربرد متوالی رابطه جابه‌جاپذیری $\hat{x}\hat{p} = i\hbar\hat{1} + \hat{p}\hat{x}$ ، خواهیم داشت

$$\begin{aligned}\hat{x}\hat{p}\hat{p} = (\hat{x}\hat{p})\hat{p} &= (i\hbar\hat{1} + \hat{p}\hat{x})\hat{p}\\ &= i\hbar\hat{p} + \hat{p}(\hat{x}\hat{p})\\ &= i\hbar\hat{p} + \hat{p}(i\hbar\hat{1} + \hat{p}\hat{x}) = 2i\hbar\hat{p} + \hat{p}\hat{p}\hat{x}\end{aligned}$$

به‌همین‌طریق می‌توان ثابت کرد که

$$\hat{p}\hat{x}\hat{x} = 2i\hbar\hat{x} + \hat{x}\hat{x}\hat{p}$$

در این صورت (۴ـ ۵۶) و (۴ ـ ۵۷) خواهند شد

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt} = \frac{\langle p\rangle}{m} \qquad \text{و} \qquad \frac{d\langle p\rangle}{dt} = -m\omega^2\langle x\rangle$$

با مشتق‌گیری از هردو معادله نسبت به‌زمان و تفکیک آنها از یکدیگر دومعادله مرتبه دوم

$$\frac{d^2}{dt^2}\langle p\rangle = -\omega^2\langle p\rangle \qquad \text{و} \qquad \frac{d^2}{dt^2}\langle x\rangle = -\omega^2\langle x\rangle$$

با جوابهای

$$\langle p\rangle = \langle p\rangle_0 \cos(\omega t + \phi_p) \qquad (۵۸-۴)$$

$$\langle x\rangle = \langle x\rangle_0 \cos(\omega t + \phi_x) \qquad (۵۹-۴)$$

به‌دست می‌آوریم . بنابراین ، با تایید قضیه اهرنفست ، مقادیر قابل انتظار ، در واقع ، یک حرکت هارمونیک ساده با فرکانس کلاسیکی را نشان می‌دهند ، اما فقط در صورتی که حالت اولیه یک ویژه حالت انرژی نباشد . نشان داده‌ایم که در چنین حالتی $\langle p\rangle_0 = \langle x\rangle_0 = 0$ ، و (۴–۵۸) و (۴–۵۹) نشان می‌دهند که $\langle x\rangle$ و $\langle p\rangle$ متحد با صفر باقی می‌مانند .

حائز اهمیت است که توجه کنیم که اگر $\langle p\rangle$ و $\langle x\rangle$ را به p_{class} و x_{class} وابسته کنیم ، در حالتهای نوسانی مانا هیچ ارتعاشی رخ نخواهد داد . اگر نوسانگر یک ذره باردار باشد ، مادامی که سیستم در یک ویژه حالت انرژی باقی بماند ، هیچ تابشی گسیل نخواهد شد . همان‌طوری که در فصل ۷ نشان خواهیم داد ، ارتعاشاتی که با گسیل پرتوزا همراه هستند وقتی رخ می‌دهند که ذره بین حالتهای ماناگذارهایی انجام دهد .

۱۳ ــ مسئله نوسانگر در نمادگذاری دیراک ــ روش نردبانی

در این بخش آخر می‌خواهیم نشان دهیم که مکانیک موجی فقط یکی از نمایشهای زیاد مکانیک کوانتومی است و طیف هامیلتونی اساسا" به‌وسیله بستگی آن به $\hat{\mathbf{p}}$ و $\hat{\mathbf{r}}$ و به روابط جابه‌جاپذیری بین این متغیرها تعیین می‌شود . ما اکنون ویژه مقدارهای هامیلتونی نوسانگر و عناصر ماتریس $\hat{x}$ در ویژه پایه $\mathscr{H}$ را بدون توسل به‌نمایش مختصه‌ای به‌دست می‌آوریم .

می‌خواهیم ویژه مقدارهای معادله

$$\mathscr{H}|n\rangle = \left\{\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2\right\}|n\rangle = \varepsilon_n|n\rangle \qquad (۶۰-۴)$$

را که در آن متغیرهای بندادی در رابط $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar\hat{1}$ صدق می‌کنند ، به‌دست آوریم . عملگرهای "کاهش‌یافته" (بدون بعد) مختصه و تکانه

$$\hat{x}' = \left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{1/2}\hat{x} \qquad \text{و} \qquad \hat{p}' = \left(\frac{1}{2m\hbar\omega}\right)^{1/2}\hat{p}$$

را که برحسب آنها (۴–۶۰) خواهد شد

$$\mathscr{H}|n\rangle = \hbar\omega(\hat{p}'^2 + \hat{x}'^2)|n\rangle = \varepsilon_n|n\rangle$$

وارد می‌کنیم . توجه کنیم که هامیلتونی می‌تواند به‌صورت

$$\mathscr{H} = \hbar\omega\{(\hat{x}' - i\hat{p}')(\hat{x}' + i\hat{p}') - i[\hat{x}', \hat{p}']\} \qquad (۶۱-۴)$$

تجزیه شود . چون $\hat{x}'$ و $\hat{p}'$ جابه‌جاپذیر نیستند ، لازم است جمله آخر جمله‌های ضربدری حاصل‌ضرب را خنثی کند . جابه‌جاگر عبارت است از

$$[\hat{x}', \hat{p}'] = \left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{1/2}\left(\frac{1}{2m\hbar\omega}\right)^{1/2}[\hat{x}, \hat{p}] = \frac{1}{2}i\hat{1} \qquad (۶۲-۴)$$

سپس عملگر

$$\hat{\eta} = \hat{x}' + i\hat{p}' \qquad (۶۳\text{ــ}۴\text{ الف})$$

و الحاقی آن

$$\hat{\eta}^\dagger = \hat{x}' - i\hat{p}' \qquad (۶۳\text{ــ}۴\text{ ب})$$

را وارد می‌کنیم . هامیلتونی (۴ــ۶۱) برحسب آنها خواهد شد

$$\mathscr{H} = \hbar\omega(\hat{N} + \tfrac{1}{2}) \qquad (۶۴-۴)$$

که در آن $\hat{N} = \hat{\eta}^\dagger\hat{\eta}$. می‌توان هامیلتونی را به‌صورت تابعی از مختصه جدید $\hat{\eta}$ و تکانهٔ همیوغ بندادی آن $\hat{\eta}^\dagger$ در نظر گرفت . از (۴ــ۶۴) می‌توان نشان دادکه رابطه جابه‌جاپذیری برای این متغیرها عبارت است از $[\hat{\eta}, \hat{\eta}^\dagger] = \hat{1}$.توجه کنیم که این متغیرهای جدید هرمیتی نیستند $(\hat{\eta}^\dagger \neq \hat{\eta})$ و در نتیجه مشاهده‌پذیر نیستند ، ولی با این وجود به‌ما امکان می‌دهند که ε_n را به‌دست بیاوریم .

برای پیداکردن ویژه‌بردارها و ویژه مقدارهای هامیلتونی در (۴ــ۶۴) کافی است معادله ویژه مقداری

$$\hat{N}|n\rangle = N_n|n\rangle \qquad (۶۵-۴)$$

را حل کنیم . کتهای $|n\rangle$ معرف ویژه بردارهای مشترک $\mathscr{H}$ و $\hat{N}$ هستند که ویژه مقدارهای آنها به‌وسیله رابطه

$$\varepsilon_n = \hbar\omega(N_n + \tfrac{1}{2}) \qquad (۶۶-۴)$$

به‌یکدیگر مربوط می‌شوند . اکنون باید ثابت کرد که‌ویژه مقدارهای $\hat{N}$ اعداد صحیح غیر ـ منفی‌اند ، یعنی، $N_n = n$ که در آن $n = ۱، ۲، \ldots$. با تاثیردادن $\hat{\eta}$ روی (۴ ـ ۶۵) خواهیم داشت

$$\hat{\eta}\hat{N}|\eta\rangle = \hat{\eta}\hat{\eta}^\dagger\hat{\eta}|n\rangle = N_n\hat{\eta}|n\rangle$$

با کاربرد رابطه جابه‌جاپذیری $\hat{\eta}\hat{\eta}^\dagger = \hat{1} + \hat{\eta}^\dagger\hat{\eta}$ ، رابطه فوق به‌صورت

$$\{\hat{1} + \hat{\eta}^\dagger\hat{\eta}\}\hat{\eta}|n\rangle = N_n\hat{\eta}|\eta\rangle$$

یا ، با ترانهادن ، به‌صورت

$$\hat{N}\{\hat{\eta}|n\rangle\} = (N_n - 1)\{\hat{\eta}|n\rangle\} \qquad (۶۷ - ۴)$$

در می‌آید . از رابطه اخیر ، (۴ـ۶۷) ، نتیجه می‌شود که اگر N_n یک ویژه‌مقدار باشد $N_n - 1$ نیز ویژه مقدار است ، که نشان می‌دهد ویژه مقدارها باهم به‌اندازه یک عدد صحیح اختلاف دارند . به‌علاوه ، جمله داخل پرانتز باید متناسب با ویژه بردار متناظربا ویژه‌مقدار $N_n - 1$ باشد ، یعنی ،

$$\hat{\eta}|n\rangle = C_n^-|n-1\rangle$$

که در آن C_n^- یک ثابت‌تناسب است . استدلال مشابهی در مورد عملگر $\hat{\eta}^\dagger$ منجر به‌نتیجه*

$$\hat{\eta}^\dagger|n\rangle = C_n^+|n+1\rangle$$

می‌شود . با ضرب‌کردن هردو رابطه در برای آنها خواهیم داشت

$$\begin{aligned}\langle n|\hat{\eta}^\dagger\hat{\eta}|n\rangle &= |C_n^-|^2\langle n-1|n-1\rangle \\ \langle n|\hat{N}|n\rangle &= N_n = |C_n^-|^2\end{aligned} \qquad (\text{۴ ـ ۶۸ الف})$$

و

$$\begin{aligned}\langle n|\hat{\eta}\hat{\eta}^\dagger|n\rangle &= |C_n^+|^2\langle n+1|n+1\rangle \\ \langle n|1 + \hat{N}|n\rangle &= 1 + N_n = |C_n^+|^2\end{aligned} \qquad (\text{۴ـ۶۸ ب})$$

---

* عملگرهای $\hat{\eta}$ و $\hat{\eta}^\dagger$ به‌ترتیب عملگرهای پائین‌آورنده (یا مخرب) و بالابرنده (یا مولد) نام‌گذاری می‌شوند .

از ۴ــ ۶۸ الف) نتیجه می‌شود $N_n \geq 0$ ، بنابراین باید یک ویژه‌مقدار کمینه غیر منفی ، $N_{n_{\min}}$ ، وجود داشته باشد . عمل پائین‌آوری روی پائین‌ترین ویژه‌حالت نباید هیچگونه حالت جدیدی ایجاد کند ، یعنی

$$\hat{\eta}|n_{\min}\rangle = C^-_{n_{\min}}|n-1\rangle = 0$$

یا ، با استفاده از C_n^- از (۴ــ۶۸ الف) ،

$$\hat{\eta}|n_{\min}\rangle = (N_{n_{\min}})^{1/2}|n-1\rangle = 0$$

رابط اخیر در صورتی می‌تواند صادق باشد که داشته باشیم $N_{n_{\min}} = 0$. عملهای بالابری متوالی نشان می‌دهد که طیف $\hat{N}$ باید از یک مجموعه اعداد صحیح مثبت و صفر تشکیل شده باشد . با قراردادن $N_n = n$، از (۴ــ۶۶) نتیجه می‌شود که طیف $\mathscr{H}$ عبارت است از

$$\varepsilon_n = \hbar\omega(n + \tfrac{1}{2}) \qquad (n = 0, 1, 2, \ldots)$$

که با روش مکانیک موجی در توافق است .

ضرایب C_n اکنون می‌توانند از (۴ــ۶۸ الف) و (۴ــ۶۸ ب) به‌صورت $C_n^- = \sqrt{n}$ و $C_n^+ = (n+1)^{1/2}$ تعیین شوند و عملهای پائین‌آوری و بالابری به‌صورت

$$|n-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}\hat{\eta}|n\rangle \qquad (۶۹ - ۴)$$

و

$$|n+1\rangle = \frac{1}{(n+1)^{1/2}}\hat{\eta}^\dagger|n\rangle \qquad (۷۰ - ۴)$$

نوشته شوند .

بدین‌ترتیب طیف $\mathscr{H}$ معین می‌شود . وقتی یکی از ویژه بردارها پیدا شد ، تمام ویژه بردارهای دیگرمی‌توانند بااستفاده از عملهای بالابری و پائین‌آوری به‌دست آیند .بخصوص اولین حالت برانگیخته می‌تواند از حالت پایه به‌وسیله عمل بالابری $|1\rangle = (1/\sqrt{1})\hat{\eta}^\dagger|0\rangle$ به‌دست آید . در واقع ، با اعمال n عمل بالابری متوالی روی $|0\rangle$ ، n امین ویژه بردار ، یعنی

$$|n\rangle = \frac{1}{(n!)^{1/2}}(\hat{\eta}^\dagger)^n|0\rangle \qquad (۷۱ - ۴)$$

را ایجاد می‌کنیم .

برای کامل‌کردن بحث ، عناصر ماتریس $\langle m|\hat{x}|n\rangle$ را محاسبه می‌کنیم . با استفاده از (۴–۶۳) ، عملگر $\hat{x}$ می‌تواند برحسب عملگرهای بالابرنده و پائین‌آورنده به‌صورت

$$\hat{x} = (2\hbar/m\omega)^{1/2}\hat{x}' = (2\hbar/m\omega)^{1/2}(\hat{\eta}^{\dagger} + \hat{\eta})/2$$

نوشته شود ، و عناصر ماتریس خواهند شد

$$\begin{aligned}\langle m|\hat{x}|n\rangle &= \tfrac{1}{2}(2\hbar/m\omega)^{1/2}[\langle m|\hat{\eta}^{\dagger}|n\rangle + \langle m|\hat{\eta}|n\rangle] \\ &= \tfrac{1}{2}(2\hbar/m\omega)^{1/2}[(n+1)^{1/2}\langle m|n+1\rangle + \sqrt{n}\langle m|n-1\rangle] \\ &= \tfrac{1}{2}(2\hbar/m\omega)^{1/2}[(n+1)^{1/2}\delta_{m,n+1} + \sqrt{n}\delta_{m,n-1}]\end{aligned}$$

بنابراین می‌توان عناصر غیرصفر را به‌صورت

$$\langle n+1|\hat{x}|n\rangle = \left[\frac{(n+1)\hbar}{2m\omega}\right]^{1/2}$$

و

$$\langle n-1|\hat{x}|n\rangle = \left[\frac{n\hbar}{2m\omega}\right]^{1/2}$$

که هردوی آنها با نتایج قبلی ، (۴–۵۳) ، مطابقت دارند ، نوشت .

مجددا" تاکید می‌کنیم که این عناصر ماتریس و ویژه مقدارها با استفاده از خواص عملگرهای متناظر ، بدون توسل به‌هیچ نمایش بخصوصی به‌دست آمده‌اند . در مسائل یک جسمی که پیچیده‌تر از مسئله موردبحث در اینجاست ، معمولا" ساده‌تر است که روی نمایش مختصه‌ای تکیه شود ، به‌شرط اینکه این نمایش وجود داشته باشد .

بالاخره نشان خواهیم داد که ویژه تابعهای نوسانگر نیز می‌توانند با استفاده از روش نردبانی ایجاد شوند. درنمایش مختصه‌ای قرارمی‌دهیم $|n\rangle \to \psi_n$ ، $\hat{x} \to x$ و $\hat{p} \to (\hbar/i)\,d/dx$. عملهای پائین‌آوری و بالابری در (۴–۶۹) و (۴–۷۰) به‌شکل

$$\hat{\eta}\psi_n = \left\{\left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{1/2} x + i\left(\frac{1}{2m\hbar\omega}\right)^{1/2}\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right\}\psi_n = \sqrt{n}\psi_{n-1} \qquad (۴-۷۲)$$

$$\mathcal{A}^{\dagger}\psi_n = \left\{\left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{1/2} x - i\left(\frac{1}{2m\hbar\omega}\right)^{1/2} \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right\}\psi_n = (n+1)^{1/2}\psi_{n+1} \qquad (۷۳-۴)$$

در می‌آیند. با قراردادن $n = 0$ در معادله اول، معادله دیفرانسیلی برای ویژه تابع حالت پایه، یعنی

$$\frac{1}{(2\alpha)^{1/2}}\left(\frac{d}{dx} + \alpha x\right)\psi_0 = 0 \qquad \left(\alpha = \frac{m\omega}{\hbar}\right)$$

را به‌دست می‌آوریم که جواب آن عبارت‌است از

$$\psi_0 = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\alpha x^2/2}$$

ضریب طوری انتخاب شده است که بهنجارش را تأمین کند. مقایسه با (۴-۴۸) نشان‌می‌دهد که نتیجه فعلی ما با نتیجه مکانیک موجی یکسان است. اولین حالت برانگیخته می‌تواند با قراردادن $n = 0$ در معادله بالابرنده (۴-۷۳) ایجاد شود. از این معادله نتیجه می‌شود

$$\frac{1}{(2\alpha)^{1/2}}\left(\frac{d}{dx} - \alpha x\right)\psi_0 = \sqrt{1}\psi_1$$

$$\frac{1}{(2\alpha)^{1/2}}\left(\frac{d}{dx} - \alpha x\right)\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\alpha x^2/2} = \psi_1$$

یا

$$\psi_1 = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-\alpha x^2/2}[2\sqrt{\alpha}\, x]$$

که با نتایج قبلی نیز مطابقت دارد. بنابراین، تمام‌ویژه تابعهای بهنجارشده می‌توانند به‌کمک عملهای بالابری متوالی ایجاد شوند.

مثالهای یک بعدی بحث شده در بالا، در حالی که به‌اندازه کافی جالب‌اند، بخصوص وقتی که نتایج آنها می‌توانند در مورد جهان سه‌بعدی به‌کار روند اهمیت پیدا می‌کنند. در فصل ۵، توجه خود را به‌ویژه حالتهای هامیلتونیها در سه‌بعد معطوف خواهیم کرد. چون حالتهای مقید و نامقید اساساً" روشهای متفاوتی را ایجاب می‌کنند، بحث در مورد حالتهای پیوسته را به‌فصل ۸ (پراکندگی) موکول می‌کنیم.

مسائل

۴–۱ ضریب بازتاب یک باریکه از ذرات فرودی روی پتانسیل پله‌ای در شکل (۴–۱۰) را پیدا کنید.

۴–۲ ثابت کنید که ضرایب بازتاب و عبور از یک سد دافعه دقیقا" به‌وسیله‌معادله (۴–۳۴) داده می‌شوند.

۴–۳ (الف) نشان دهید که برای $\varepsilon \ll V_0$ و $a \gg 1$ (یعنی، $Ka \gg 1$) ضریب عبور در معادله (۴–۱۰) دارای شکل مجانبی $\mathscr{T} \sim e^{-2Ka}$ است.

(ب) بافرض اینکه ضریب عبور تقریبی برای یک مجموعه از سدهای مجاور یکدیگر (شکل ۴–۱۱) برابر است با حاصل‌ضرب ضرایب انفرادی، نشان دهید که برای N تا از چنین سدهایی داریم

$$\mathscr{T} \sim \exp\left(-2\sum_{i=1}^{N} K_i a_i\right) \qquad , \qquad K_i = \frac{[2m(V_{0_i} - \varepsilon)]^{1/2}}{\hbar}$$

(ج) با به‌کاربردن نتیجه فوق نشان دهید که برای یک سد دافعه دلخواه، ولی با تغییرات آرام، ضریب عبور تقریبی به‌وسیله

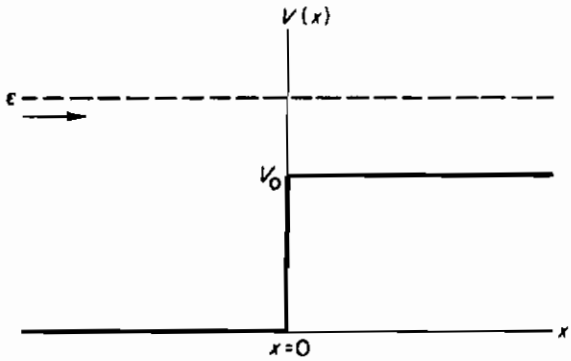
$$\mathscr{T} \sim \exp\left\{-2\int_{x_1}^{x_2} \frac{[2m(V(x) - \varepsilon)]^{1/2}}{\hbar}\, dx\right\}$$

که در آن x_1 و x_2 نقاط کلاسیکی بازگشت حرکت (شکل ۴–۱۲) هستند، داده‌می‌شود. چه فرضهائی برای به‌دست‌آوردن این عبارت به‌کار رفته‌اند؟ (رک پیوست الف).

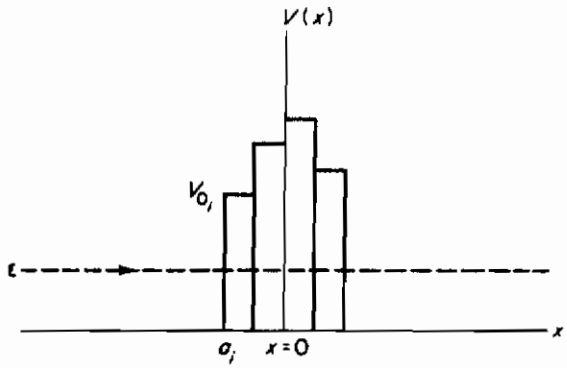
۴–۴ با به‌کاربردن نتیجه "نیمه کلاسیکی" داده شده در مسئله (۴–۳ ج) ضریب عبور تقریبی برای یک پتانسیل مثلثی (شکل ۴–۱۳) را وقتی $\varepsilon = \frac{1}{4}V_0$ باشد پیدا کنید.

۴–۵ ضریب بازتاب را برای یک سد "دوگانه" در شکل (۴–۱۴)، وقتی $\varepsilon < V_0$ باشد محاسبه کنید.

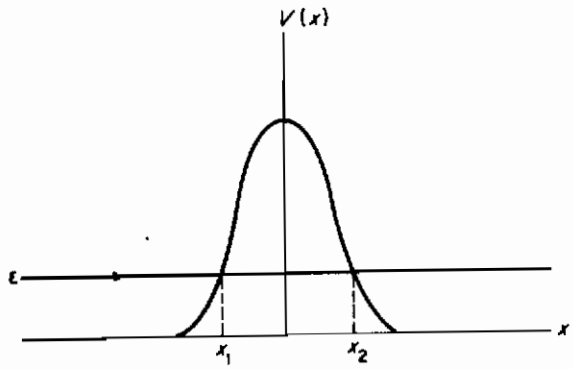
۴–۶ ضریب عبور را برای یک باریکه از ذرات فرودی روی یک پتانسیل به‌شکل تابع دلتا، $V = A\delta(x)$، پیدا کنید. (راهنمائی: معادله (۴–۱۰ ب) را به‌کار ببرید و در حالی که حاصل‌ضرب $V_0 a$ را ثابت نگاه می‌دارید، $V_0 a = A = \text{const}$، قرار دهید $a \to 0$ و $V_0 \to \infty$)



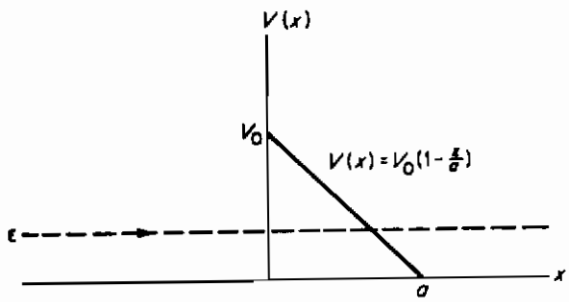
شکل ۴—۱۰



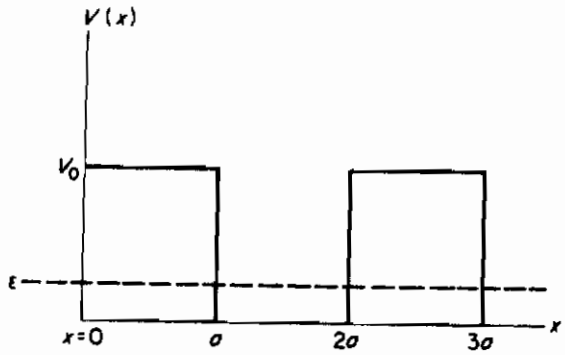
شکل ۴—۱۱



شکل ۴—۱۲



شکل ۴—۱۳



شکل ۴–۱۴

۴–۷ (الف) با انجام انتگرالهای لازم برای ذره‌ای که در یک چاه بینهایت غیرمتقارن قرار دارد روابط زیر را تحقیق کنید

$$\langle x\rangle_n = \tfrac{1}{2}a \qquad \langle p\rangle_n = 0$$
$$\langle x^2\rangle_n = \frac{a^2}{3} - \frac{a^2}{2\pi^2 n^2} \qquad \langle p^2\rangle_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{a^2}n^2 \qquad (n = 1, 2, \ldots)$$

(ب) نشان دهید که $\Delta p_n{}^2\,\Delta x_n{}^2 \geqslant \frac{1}{4}\hbar^2$ برای تمام مقادیر n صادق است. مقدار $\Delta p_n\,\Delta x_n$ در حالت پایه، $n = 1$، چقدر است؟

۴–۸ با استفاده از رابطه $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar\hat{1}$، نشان دهید که اگر عملگر پاریته با $\hat{x}$ پاد جابه‌جاپذیر باشد (یعنی، $\hat{P}\hat{x} = -\hat{x}\hat{P}$) با $\hat{p}_x$ نیز پاد جابه‌جاپذیر است (راهنمائی: عملگر همانی با تمام عملگرها، از جمله پاریته، جابه‌جاپذیر است).

۴–۹ با استفاده از رابطه جابه‌جاپذیری $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar\hat{1}$ نشان دهید که

$$[\hat{p}_x, \hat{x}^n] = -i\hbar\, n\hat{x}^{n-1} \qquad \text{و} \qquad [\hat{x}, \hat{p}_x{}^n] = i\hbar\, n\hat{p}_x{}^{n-1}.$$

(به‌طور کلی‌تر، $[\hat{x}, \hat{G}(\hat{p}_x)] = i\hbar(d\hat{G}/d\hat{p}_x)$ و $[\hat{p}_x, \hat{F}(\hat{x})] = -i\hbar(d\hat{F}/d\hat{x})$.)

۴–۱۰ با به‌کاربردن نتایج مسئله (۴–۹) نشان دهید که برای هر هامیلتونی به‌شکل

$$\mathscr{H} = \frac{\hat{p}_x{}^2}{2m} + a\hat{x}^n$$

رابطه عملگری زیر برقرار است

$$[\hat{x}\hat{p}_x, \hat{\mathscr{H}}] = i\hbar\left(\frac{\hat{p}_x^{\,2}}{m} - an\hat{x}^n\right) = i\hbar(2\hat{T} - n\hat{V})$$

(توجه‌کنید که برای یک حالت *مانای* مقید ، قضیه اهرنفست ایجاب می‌کند

$$\frac{d\langle xp_x\rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{x}\hat{p}_x, \hat{\mathscr{H}}]\rangle = 0$$

بنابراین داریم $2\langle T\rangle = n\langle V\rangle$. این نتیجه ، قضیه ویریال کوانتومی برای یک پتانسیل توانی نامیده می‌شود . برای یک نوسانگر $(n = 2)$ ، خواهیم داشت $\langle T\rangle = \langle V\rangle$.)

۴–۱۱ ویژه مقدارها و ویژه تابعهای انرژی را برای ذره‌ای که در پتانسیل $V = \frac{1}{2}m\omega^2\ (x^2 - 2bx)$ قرار دارد پیدا کنید .
(راهنمائی: پتانسیل را به‌صورت یک مربع کامل در آورید و این هامیلتونی را با هامیلتونی مربوط به‌پتانسیل نوسانگر، یعنی $V = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ ؛ مقایسه کنید)

۴–۱۲ انرژی حالت پایه یک نوسانگر را با کمینه‌کردن

$$\varepsilon = \frac{\Delta p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\Delta x^2$$

و با توجه به‌تحدید "عدم قطعیت"

$$\Delta p\,\Delta x = \tfrac{1}{2}\hbar$$

پیدا کنید .

۴–۱۳ انرژی حالت پایه یک الکترون

$$(m = 9 \times 10^{-28}\ \text{gm})$$

واقع در یک چاه یک‌بعدی متناهی به‌ارتفاع $V_0 \sim 10\ \text{eV} \sim 1.6 \times 10^{-11}\ \text{erg}$ و پهنای $a = 10^{-8}\ \text{cm}$ را به‌روش ترسیمی محاسبه کنید .

۴–۱۴ ثابت کنید که اگر یک عملگر $\hat{A}$ هرمیتی باشد و در رابطه $\hat{A}^2 = \hat{1}$ صدق کند ، ویژه مقدارهای آن عبارتنداز ± 1 . یک عملگر با ویژگی $\hat{A}^2 = \hat{1}$ *درون‌گرا* نامیده می‌شود .

۴ــ۱۵ سیستمی درنظربگیریم که به‌وسیله هامیلتونی‌یک ذره‌آزاد (یک بعدی) $\mathscr{H} = \hat{p}^2/2m$ اداره می‌شود .

(الف) با استفاده از معادله (۳ــ۹۴) نشان دهید که "انتشاردهنده" این ذره آزاد می‌تواند به‌صورت

$$G(x, x', t, t_0) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{(2\pi\hbar)} e^{-ip^2\tau/2m\hbar} e^{ipX/\hbar}$$

که درآن $X = x - x'$ و $\tau = t - t_0$ می‌باشد ، بیان شود .

(ب) انتگرال‌گیری را انجام دهید و نشان دهید که

$$G(X, \tau) = \left[\frac{m}{2\pi i\hbar\tau}\right]^{1/2} e^{imX^2/2\hbar\tau}$$

(راهنمائی : نما را به‌صورت مربع کامل درآورید و از

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2}\, du = \sqrt{\pi}.)$$

استفاده کنید .)

(ج) فرض کنید که در لحظه $t_0 = 0$ یک ذره آزاد در حالتی که به‌وسیله بسته موج

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{(\pi\delta^2)^{1/4}} e^{-x^2/2\delta^2} e^{ip_0x/\hbar}$$

نمایش داده می‌شود قرار دارد . توجه کنید که در لحظه $t_0 = 0$ ، چگالی احتمال یک تابع گاوسی باپهنای متوسط δ می‌باشد . با استفاده از معادله (۳ــ۹۳) نشان دهید که با گذشت زمان بسته موج گسترده می‌شود .

مراجع پیشنهادی

Arfken, G., "Mathematical Methods for Physicists," 2nd ed., Chapter 9. Academic Press, New York, 1970.

Bohm, D., "Quantum Theory," Chapter 11. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1951.

Borowitz, S., "Fundamentals of Quantum Mechanics," Chapter 9. Benjamin, New York, 1967.

Eisberg, R. M., "Fundamentals of Modern Physics," Chapter 8. Wiley, New York, 1961.

Merzbacher, E., "Quantum Mechanics," 2nd ed., Chapter 6. Wiley, New York, 1970.

Messiah, A., "Quantum Mechanics," Vol. I, Chapter 3. Wiley, New York, 1961.

Pauling, L., and Wilson, E. B., "Introduction to Quantum Mechanics," Chapter 3. McGraw-Hill, New York, 1935.

Saxon, D. S., "Elementary Quantum Mechanics," Chapter 6. Holden-Day, San Francisco, 1964.

۵

مکانیك موجی در سه بعد

مسائلی که قرار است در این فصل موردبررسی قرار گیرند شامل یک ذره در یک چاه (جعبه) مستطیلی، نوسانگر سه‌بعدی، و مسئله‌کولنی (اتم هیدرژن) است. به‌خاطر اهمیتی که موضوع اخیر در نظریه اتمی دارد توجه خاصی به‌آن مبذول خواهد شد.

به‌عنوان یک قاعده، تعداد شاخصهای (اعداد کوانتومی) لازم برای کاملا" مشخص‌کردن یک حالت برابر است با تعداد درجات آزادی وابسته به‌سیستم کلاسیکی متناظر. در مسئله یک‌بعدی‌بحث شده در فصل ۴ فقط یک شاخص (n) کافی بود، اما در سه‌بعد سه عدد کوانتومی لازم است. در زیر خواهیم دید که چگونه این اعداد پدیدار می‌شوند.

برخلاف حالتهای مقید در یک بعد، ویژه حالتهای یک هامیلتونی در سه‌بعد غالبا" به‌طور شدیدی تبهگن‌اند*. تبهگنی همواره از تقارن خاصی که در مسئله فیزیکی وجود دارد نتیجه می‌شود. بنابراین ویژه تابعها دیگر منحصر به‌فرد نیستند و لزوما" بر یکدیگر عمود نیستند. راست‌هنجاری هردسته ویژه تابع باید تحقیق شود. به‌علاوه، هرترکیب خطی از ویژه‌تابعهای تبهگن یک ویژه تابع جدید متمایزی از همان انرژی است. بنابراین، وقتی یک دسته ویژه تابع پیدا شد می‌توان تعداد زیادی دسته‌های تبهگن جدید ایجاد کرد. معنی فیزیکی هردسته و دلیل اینکه دسته خاصی‌ایجاد شده است در بحثی که در زیر خواهد آمد روشن خواهد شد.

---

* قضیه ۹ که امکان تبهگنی در مسائل مقید یک‌بعدی را طرد می‌کند در سه‌بعد معتبرنیست.

۱ ــ مسئله ویژه مقداری در سه‌بعد

معادله ویژه مقداری انرژی شرودینگر به‌شکل زیر است

$$\mathscr{H}|\varepsilon_i\rangle = \varepsilon_i|\varepsilon_i\rangle \rightarrow \left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right\}\psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i\,\psi_i(\mathbf{r}) \qquad (۱-۵)$$

که همان‌طوری که نشان خواهیم داد شاخص i مخفف مجموعه شاخصهااست . معادله (۵ــ ۱) یک معادله با مشتقات جزئی است که برای پیداکردن تابع $\psi_i(\mathbf{r})$ باید حل شود . چون در اینجا با حالتهای مقید سروکار داریم ، آن جوابهائی را جستجو خواهیم کرد که دربینهایت صفر شوند ، یعنی

$$\psi_i(\mathbf{r}) = \langle\mathbf{r}|\varepsilon_i\rangle \xrightarrow[r\to\infty]{} 0$$

یک روش متعارف برای حل معادله مزبور روش تفکیک متغیرها است . این تفکیک ممکن است در مختصات دکارتی انجام گیرد ، یا ممکن است لازم باشد که تبدیلی به‌سیستم مختصات دیگری (به‌عنوان مثال ،مختصات قطبی کروی یا استوانه‌ای) انجام گیرد . خواهیم دید که در مورد تبهگنی ،سیستم مختصاتی که در تفکیک متغیرها به‌کار می‌رود مجموعه بخصوص‌ویژه تابعهای به‌دست آمده را تعیین خواهد کرد . سپس تشخیص مشخصات این مجموعه به‌عهده ما قرارخواهدگرفت . با بررسی مسائلی‌که درمختصات دکارتی قابل حل باشندشروع‌می‌کنیم.

۲ ــ ذره آزاد (مختصات دکارتی)

هامیلتونی ذره آزاد ، $V = 0$ ، فقط حالتهای نامقید را در بر می‌گیرد و ، در حقیقت ، به‌پراکندگی در فصل ۸ تعلق دارد . مع هذا ، برای روشن‌کردن مفهوم تبهگنی و اینکه چگونه درمکانیک‌کوانتومی ظاهر می‌شود ، آنرا در اینجا به‌طور اختصار موردبحث قرارخواهیم‌داد.
معادله شرودینگر به‌شکل

$$\mathscr{H}\psi_\varepsilon = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_\varepsilon = \varepsilon\psi_\varepsilon \qquad (۲-۵)$$

در می‌آید . روش تفکیک متغیرها پیشنهاد می‌کند که جوابی به‌شکل

$$\psi_\varepsilon(\mathbf{r}) = X(x)Y(y)Z(z) \qquad (۳-۵)$$

را آزمایش کنیم . اگر این جواب آزمایشی در نهایت به‌سه‌معادله دیفرانسیل معمولی برای x ، y و z منجر شود می‌گوئیم‌که (۵ــ۲) درمختصات دکارتی تفکیک‌پذیر است .باقراردادن (۵ــ۳) در (۵ــ۲) خواهیم داشت

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left\{YZ\frac{d^2X}{dx^2}+XZ\frac{d^2Y}{dy^2}+XY\frac{d^2Z}{dz^2}\right\}=\varepsilon XYZ$$

یا

$$\left\{\frac{1}{X}\frac{d^2X}{dx^2}+\frac{1}{Y}\frac{d^2Y}{dy^2}+\frac{1}{Z}\frac{d^2Z}{dz^2}\right\}=-k^2$$

که در آن $k^2=2m\varepsilon/\hbar^2$

هرکدام از جملات طرف چپ این معادله تابعی از فقط یک متغیر است : حاصل جمع تنها درصورتی می‌تواند مقدار ثابتی باشد که هرکدام از جملات مستقلا" ثابت باشند ،یعنی

$$\frac{1}{X}X''=-k_x{}^2,\qquad \frac{1}{Y}Y''=-k_y{}^2,\qquad \frac{1}{Z}Z''=-k_z{}^2$$

که در آنها $k_x{}^2+k_y{}^2+k_z{}^2=k^2=2m\varepsilon/\hbar^2$.

راحت‌تر است که سه‌عدد کوانتومی (پیوسته) k_x ، k_y و k_z را در یک عدد کوانتومی برداری $\mathbf{k}=k_x\mathbf{i}+k_y\mathbf{j}+k_z\mathbf{k}$ خلاصه‌کنیم .جوابهای‌سه‌معادله‌فوق‌عبارتنداز $X\sim e^{ik_xx}$ ، $Y\sim e^{ik_yy}$ و $Z\sim e^{ik_zz}$ ، بنابراین ویژه تابعها و ویژه مقدارهای ذره آزاد می‌توانند به صورت

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})=N_{\mathbf{k}}\,e^{ik_xx}e^{ik_yy}e^{ik_zz}=N_{\mathbf{k}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \qquad (۵ــ۴ \text{ الف})$$

و

$$\varepsilon_{\mathbf{k}}=\frac{\hbar^2|\mathbf{k}|^2}{2m} \qquad (۵ــ۴ \text{ ب})$$

نوشته شوند*

---

* قراردادن $N_k=(1/2\pi\hbar)^{3/2}$ توابع را بر طبق قانون قراردادی زیر بهنجار می‌کند ، یعنی

$$\langle\mathbf{k}|\mathbf{k}'\rangle=\int\psi_{\mathbf{k}}{}^*(\mathbf{r})\psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r})\,d\mathbf{r}=\delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}')/\hbar^3$$

اما روش دیگری (بهنجارش جعبه‌ای)نیز مورد استفاده قرار می‌گیرد که در آن‌ذره در یک جعبه بزرگ با حجم $\mathscr{V}$ در نظر گرفته می‌شود . در این روش قرار می‌دهیم $N_k=1/\sqrt{\mathscr{V}}$ و پس از اینکه محاسبات به‌انجام رسید حد $\mathscr{V}\to\infty$ را اعمال می‌کنیم .

بردار کوانتومی $\mathbf{k}(k_x, k_y, k_z)$ ویژه تابع دکارتی و ویژه مقدار آنرا مشخص می‌کند .
وجود یک تبهگنی باید روشن شود .توجه‌کنیم کـه انرژی فقـط تابـع اندازهٔ $\mathbf{k}$ می‌باشد. تغییر جهت $\mathbf{k}$ (تغییر k_x ، k_y و k_z) ،در حالی که داشته باشیم

$$|\mathbf{k}| = (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)^{1/2} = k_0$$

منجر به‌ایجاد ویژه تابعهای جدیدی در (۵ــ۴) می‌شود ، بدون اینکه ویژه‌مقدارها تغییرکرده باشند . بنابراین هرترکیب خطی از این ویژه‌تابعهای تبهگن نیز یک ویژه تابع انرژی خواهد بود . به‌علت طبیعت پیوسته طیف ، این ترکیب صورت یک انتگرال

$$\psi_{k_0}(\mathbf{r}) = \int_{|\mathbf{k}|=k_0} a(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d\Omega_{\mathbf{k}} \qquad (۵-۵)$$

را به‌خود می‌گیرد که در آن انتگرال روی کره‌ای به‌شعاع k_0 در فضای $\mathbf{k}$ گرفته مـــی‌شـود و مـا را مطمئن می‌سازد کـه فقط ویژه تابعهـای تبهگن باهم مخلوط شده‌اند . بنابـــر ایـــن با انتخاب هر ضریب اختلاط $a(\mathbf{k})$ یک ویژه تابع جدید $\psi_{k_0}(\mathbf{r})$ با همان‌انرژی $\varepsilon_{k_0} = \hbar^2 k_0^2/2m$ ایجاد خواهیم کرد .

حال که می‌بینم جوابهای (۵ــ۲) یکتا نیستنـد ، بایـد سئوال کنیـــــم : اهمیـت فیزیکی مجموعه ویژه تابعهای $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ در چیست و چرا به‌جای آن مجموعه‌هـای دیگر ظاهـر نمی‌شوند ؟ مشاهده می‌کنیم که برای یک ذره آزاد $(\mathscr{H} = \hat{p}^2/2m)$ داریم $[\hat{\mathbf{p}}, \mathscr{H}] = 0$ ، که از آن نتیجه می‌شود که برای $\mathscr{H}$ و $\hat{\mathbf{p}}$ یک مجموعه ویژه تابعهای مشترک وجوددارد . طبیعتا" باید بررسی کنیم که آیا $\psi_{\mathbf{k}}$ همان مجموعه است . با تأثیـردادن $\hat{\mathbf{p}} = (\hbar/i)\nabla$ روی $\psi_{\mathbf{k}}$ داریم

$$\frac{\hbar}{i}\nabla\psi_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar}{i}\nabla e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \hbar\mathbf{k}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \hbar\mathbf{k}\psi_{\mathbf{k}} \qquad (۶-۵)$$

از مقایسه طرفهای راست و چپ مشاهده می‌کنیم که در حقیقت $\psi_{\mathbf{k}}$ به‌طور همزمان ویـژه تابع $\hat{\mathbf{p}}$ با ویژه مقدار $\hat{\mathbf{p}} = \hbar\mathbf{k}$ است . بنابراین جواب دکارتی ذره آزاد به‌طور کاملا" طبیعی ما را به‌ویژه تابع تکانه هدایت می‌کند .

تحول زمانی این ویژه تابع تکانه عبارت است از (رک ۳ــ۶۷)

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = e^{-i\varepsilon_k t/\hbar}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{-i\varepsilon_k t/\hbar} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega_k t)} \qquad (۷-۵)$$

و معادل است با انتشار یک موج تخت (در امتداد $\mathbf{k}$) با

$$\omega_k = \frac{\varepsilon_k}{\hbar} = \frac{\hbar^2 k^2}{\hbar 2m} = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

و $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$. از رابطه اخیر نتیجه می‌شود که طول موج ، $\lambda = 2\pi/k = h/p$ ، با فرضیه دوبروی سازگار است و می‌توانیم این ویژه‌تابع تکانهٔ ذره‌آزاد را با موج دوبروی یکی‌بدانیم.

با این وجود ، طبیعت غیرفیزیکی موج وقتی ظاهر می‌شود که سرعت فاز آنرا محاسبه کنیم

$$v_{\text{phase}} = \frac{\omega_k}{k} = \frac{\hbar k^2}{2mk} = \frac{\hbar k}{2m} = \frac{p}{2m} = \frac{1}{2} v_{\text{particle}}$$

علی‌رغم آنچه‌که می‌تواند انتظار رود ، سرعت فاز با سرعت ذره برابر نیست . باید به‌خاطر آورد کـه فقط جنبه‌های احتمالاتی $\psi_{\mathbf{k}}$ دارای معنی فیزیکی است . با اعمال عملگـر جریـان (۳ـ۹۶) به $\psi_{\mathbf{k}}$ خواهیم داشت

$$-\frac{i\hbar}{2m}(\psi_{\mathbf{k}}^* \nabla\psi_{\mathbf{k}} - \psi_{\mathbf{k}} \nabla\psi_{\mathbf{k}}^*) = \frac{\hbar\mathbf{k}}{m}\psi_{\mathbf{k}}^*\psi_{\mathbf{k}}$$

$$\mathbf{J} = \frac{\mathbf{p}}{m}\psi_{\mathbf{k}}^*\psi_{\mathbf{k}} = \mathbf{v}_{\text{particle}}\mathscr{P}_{\mathbf{k}} \qquad (۸-۵)$$

*بنابراین ، سرعت جریان احتمال با سرعت ذره آزاد برابر است**.

در تحلیل معادله ذره آزاد (۵ـ۲) به‌طور طبیعی به‌ویژه تابعهـای تکـانـهٔ خطـی $\psi_{\mathbf{k}} = N_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ هدایت شدیم زیرا این معادله را در مختصات دکارتی تفکیک کرده بودیم . اگر معادله را در مختصات کروی تفکیک کرده بودیم ، به‌توابعی به‌شکل

$$\psi_{klm_l}(r, \theta, \phi) = j_l(kr) Y_{lm_l}(\theta, \phi)$$

هدایت می‌شدیم که در آن j_l یک *تابع بسل کروی* و Y_{lm_l} یک *هماهنگ کروی* است . نشـان خواهیم داد که این توابع به‌طور همزمان ویژه تابعهای انرژی و تکانهٔ زاویه‌ای (و نه تکانـهٔ

---

* این سرعت جریان هم‌چنین با سرعت موسوم به‌سرعت "گروه" موج دوبروی، که به‌صورت $v_{\text{group}} = \partial\omega/\partial k$ تعریف می‌شود ، برابر است .

خطی) هستند، ودارای شکل ریاضی وابسته به امواج کروی (و نه امواج تخت) می‌باشند. اعداد کوانتومی l و m_l به حالتهای تکانهٔ زاویه‌ای مربوط می‌شوند در حالی که k، با رابطه $\varepsilon_k = \hbar^2 k^2/2m$ به انرژی مربوط می‌شود. توجه کنیم که دومجموعه ویژه‌تابع $\psi_{\mathbf{k}}(xyz)$ و $\psi_{klm_l}(r, \theta, \phi)$ از یکدیگر متمایزاند زیرا $\hat{\mathbf{p}}$ و $\hat{\mathbf{L}}$ سازگاراند (یعنی، $[\hat{\mathbf{L}}, \hat{\mathbf{p}}] \neq 0$). بااین وجود همان طوری که در بخش ۸ خواهیم دید هر ویژه تابع تکانهٔ خطی همواره یک ترکیب خطی از ویژه تابعهای تبهگن تکانه زاویه‌ای است.

۳ ــ ذره در یک جعبه

برای تعمیم یک چاه بینهایت یک بعدی، *حالتهای مقید* یک ذره را که در یک پتانسیل جعبه مستطیل‌شکل قرار دارد در نظر می‌گیریم. معادله شرودینگر به‌صورت

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right\}(\psi_i \mathbf{r}) = \varepsilon_i \psi_i(\mathbf{r}) \qquad (۹-۵)$$

در می‌آید که در آن

$$V(\mathbf{r}) = 0 \quad ، \quad 0 \leqslant x \leqslant a, 0 \leqslant y \leqslant b, \text{ و } 0 \leqslant z \leqslant c \quad \text{برای}$$
$$V = \infty \quad \text{جاهای دیگر}$$

مثل حالت یک بعدی در فصل ۴، می‌خواهیم که $\psi(\mathbf{r})$ در مرزهای چاه صفر شود. طبیعت مستطیلی بودن مرز پتانسیل پیشنهاد می‌کند که این مسئله باید در مختصات دکارتی تفکیک‌پذیر باشد. در واقع، مانند حالت قبل، جایگذاری $\psi_i = X(x)Y(y)Z(z)$ فوراً منجر به‌معادلات دیفرانسیل

$$X'' = -k_x^2 X, \qquad Y'' = -k_y^2 Y, \qquad Z'' = -k_z^2 Z$$

می‌شود که در آنها $k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = k^2 = 2m\varepsilon/\hbar^2$. چون ویژه تابعها باید در خارج از چاه ودر مرزهای آن (که در آنجا $V=\infty$ است) صفر شوند، جوابهای قابل قبول باید به‌شکل

$$X_{n_x} = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \sin k_x x, \qquad Y_{n_y} = \left(\frac{2}{b}\right)^{1/2} \sin k_y y, \qquad Z_{n_z} = \left(\frac{2}{c}\right)^{1/2} \sin k_z z$$

باشند که در آن

$$k_x = \frac{n_x \pi}{a}, \qquad k_y = \frac{n_y \pi}{b}, \quad k_z = \frac{n_z \pi}{c} \qquad (۱۰-۵)$$

و $n_x, n_y, n_z = ۱، ۲، ۳، ...$. ویژه تابعها به‌وسیله سه‌عدد کوانتومی n_x ، n_y و n_z مشخص می‌شوند و به‌شکل

$$\psi_{n_x n_y n_z} = \left(\frac{8}{abc}\right)^{1/2} \sin\frac{n_x \pi x}{a} \sin\frac{n_y \pi y}{b} \sin\frac{n_z \pi z}{c} \qquad (۱۱-۵)$$

در می‌آیند و ویژه مقدارهای انرژی خواهند شد

$$\begin{aligned} \varepsilon_{n_x n_y n_z} &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \\ &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m}\left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2}\right) \end{aligned} \qquad (۱۲-۵)$$

توجه کنیم که ضریب بهنجارش در (۵-۱۱) متناسب است با $(\text{حجم جعبه})^{-1/2}$.

عموما" ، این مسئله تبهگنی ندارد . ولی می‌توان با افزایش تقارن فضائی یک تبهگنی ایجاد کرد . به‌عنوان مثال ، اگر قراردهیم $a = b = c$ ، ویژه مقدارها به‌شکل

$$\varepsilon_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \qquad (۱۳-۵)$$

در می‌آیند . دراینجا مشاهده می‌کنیم که این مقادیر انفردای n_x ، n_y و n_z نیستند که انرژی را تعیین می‌کنند بلکه مجموع مربعهای آنهاست که انرژی را می‌دهد . بنابراین در حالی که حالت پایه ε_{111} با انرژی $\varepsilon_{111} = [\hbar^2\pi^2/2ma^2]$ (3) ناتبهگن است ، سه‌حالت برانگیخته اول ψ_{112}، ψ_{121} و ψ_{211} با انرژی $\varepsilon_{112} = \varepsilon_{121} = \varepsilon_{211} = [\hbar^2\pi^2/2ma^2]$ ، به‌طور سه‌گانه‌ای تبهگن‌اند . برای حالتهای با انرژی بالاتر این تبهگنی ممکن است زیادتر باشد . به‌علت تبهگنی ، ترکیب خطی $\psi' = \alpha\psi_{112} + \beta\psi_{121} + \gamma\psi_{211}$ هم یک ویژه تابع دیگر وابسته به‌اولین حالت برانگیخته است . هم‌چنین ، چون توابع $\psi_{n_x n_y n_z}(\mathbf{r})$ منحصر به‌فرد نیستند، متعامد بودن آنها باید تحقیق شود و نمی‌تواند بدون تحقیق‌پذیرفته شود . این ویژه تابعهای جعبه‌ای ویژه تابعهای تکانه نیستند زیرا برای هامیلتونی جعبه‌ای $[\hat{\mathbf{p}}, \mathscr{H}] \neq 0$. هروقت هامیلتونی شامل $\mathbf{p}$ (از طریق پتانسیل $\mathcal{V}(\mathbf{p})$) باشد ، با تکانه خطی ناسازگار است .

ویژه تابعهای $\psi_{n_x n_y n_z}(\mathbf{r})$ در حد $a, b, c \to \infty$ باید متناظر با ویژه تابعهای ذرات آزاد باشند و انتظار داریم که توابع سینوسی در (۵–۱۱) مثل امواج تخت بهنجارشدهٔ جعبه‌ای* رفتار کنند ، یعنی

$$\psi_{n_x n_y n_z}(\mathbf{r}) \to \frac{1}{(abc)^{1/2}} e^{ik_x x} e^{ik_y y} e^{ik_z z} = \frac{1}{(abc)^{1/2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$
$$= \frac{1}{\sqrt{\mathscr{V}}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \qquad (۱۴-۵)$$

چون ویژه تابعهای ذره آزاد مربوط به‌طیف پیوسته هستند جمع‌بندی روی حالتها به‌صورت انتگرال در می‌آید ، یعنی ،

$$\sum_{n_x n_y n_z > 0} \to \int_{\text{positive } n_i} dn_x\, dn_y\, dn_z \qquad (۱۵-۵)$$

با استفاده از (۵–۱۰) ، انتگرال می‌تواند به‌صورت زیر درآید

$$\int_{\substack{n_x n_y n_z \\ \text{positive}}} dn_x\, dn_y\, dn_z = \frac{abc}{\pi^3} \int_{\substack{k_x k_y k_z \\ \text{positive}}} dk_x\, dk_y\, dk_z = \frac{\mathscr{V}}{\pi^3} \int_{\substack{\mathbf{k} \text{ in} \\ \text{first octant}}} d\mathbf{k}$$
$$= \frac{\mathscr{V}}{8\pi^3} \int_{\substack{\mathbf{k} \text{ over} \\ \text{all space}}} d\mathbf{k} \qquad (۱۶-۵)$$

می‌توانیم ، با تبدیل به‌مختصات قطبی کروی در فضای $\mathbf{k}$ ، انتگرال روی‌حالتهارا به‌انتگرال روی انرژی تبدیل کنیم و نتیجه بگیریم

$$\frac{\mathscr{V}}{8\pi^3} 4\pi \int_0^\infty k^2\, dk = \int_0^\infty \rho(\varepsilon)\, d\varepsilon$$

با استفاده از رابطه $\hbar^2 k^2/2m = \varepsilon$ ، $\rho(\varepsilon)$ می‌تواند به‌صورت زیر محاسبه شود

$$\rho(\varepsilon) = \frac{(2m)^{3/2}\mathscr{V}}{4\pi^2\hbar^3} \sqrt{\varepsilon} \qquad (۱۷-۵)$$

---

* در این نمایش ذرات آزاد ، شرایط مرزی‌ای که ایجاب می‌کنند ویژه تابعها در بینهایت صفر شوند ، با شرایط مرزی موسوم به " شرایط مرزی "تناوبی" جایگزین شده است .

تابع $\rho(\varepsilon)$ میزان بستگی چگالی تبهگنی (تعداد حالتهای تبهگن در واحد انرژی) به ε برای یک ذره‌آزاد را می‌دهد و *چگالی حالتها* نامیده می‌شود. در بحث مربوط به‌نظریه پراکندگی استفاده زیادی از (۵ــ۱۷) خواهیم کرد.

۴ ــ نوسانگر ناهمسانگرد

نوسانگر ناهمسانگرد سه‌بعدی عبارت است از ذره‌ای که به‌وسیله یک نیروی کشسان، که ضرایب کشسانی آن به‌جهت مکان ذره نسبت به‌مبداء بستگی دارد، به‌مبداء مقید شده‌است. معادله شرودینگر برای این پتانسیل عبارت است از

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+\frac{1}{2}m\omega_x{}^2x^2+\frac{1}{2}m\omega_y{}^2y^2+\frac{1}{2}m\omega_z{}^2z^2\right\}\psi_i=\varepsilon_i\psi_i \qquad (۱۸-۵)$$

که در آن $\omega_x{}^2=K_x/m$ ، $\omega_y{}^2=K_y/m$ و $\omega_z{}^2=K_z/m$. در اینجا نیز، اگر جوابی به‌شکل $\psi_i=X(x)Y(y)Z(z)$ به‌کار بریم، تفکیک صورت می‌گیرد. در این مورد سه‌معادله زیر را به‌دست می‌آوریم

$$-\frac{\hbar^2}{2m}X''+\frac{1}{2}m\omega_x{}^2x^2X=\varepsilon_x X$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}Y''+\frac{1}{2}m\omega_y{}^2y^2Y=\varepsilon_y Y$$

و

$$-\frac{\hbar^2}{2m}Z''+\frac{1}{2}m\omega_z{}^2z^2Z=\varepsilon_z Z$$

که در آنها داریم $\varepsilon_i=\varepsilon_x+\varepsilon_y+\varepsilon_z$. جوابهای این معادلات قبلاً در حالت یک بعدی به‌دست آمده‌اند (رک ۴ــ۴۷). ویژه تابعها و ویژه مقدارهای (۵ــ۱۸) می‌توانند به‌صورت زیر نوشته شوند

$$\begin{aligned}\psi_{n_xn_yn_z}(x,y,z)=X_{n_x}Y_{n_y}Z_{n_z}=\left[\frac{\alpha_x\alpha_y\alpha_z}{\pi^3}\right]^{1/4}\left[\frac{1}{2^{n_x+n_y+n_z}n_x!\,n_y!\,n_z!}\right]^{1/2}\\ \times\exp[-\tfrac{1}{2}(\alpha_x x^2+\alpha_y y^2+\alpha_z z^2)]\,H_{n_x}((\alpha_x)^{1/2}x)\\ \times H_{n_y}((\alpha_y)^{1/2}y)\,H_{n_z}((\alpha_z)^{1/2}z)\end{aligned} \qquad (۱۹-۵)$$

و

$$\varepsilon_{n_x n_y n_z} = (n_x + \tfrac{1}{2})\hbar\omega_x + (n_y + \tfrac{1}{2})\hbar\omega_y + (n_z + \tfrac{1}{2})\hbar\omega_z$$
$$(n_x, n_y, n_z = 0, 1, 2, 3, \ldots) \qquad (۲۰-۵)$$

عدم تبهگنی باید به‌فقدان تقارن در هامیلتونی نسبت داده شود . برای اثبات این مطلب ، مورد خاص یک نوسانگر همسانگرد $(K_x = K_y = K_z)$ را در نظر بگیریم که برای آن داریم

$$\varepsilon_{n_x n_y n_z} = (n_x + n_y + n_z)\hbar\omega + \tfrac{3}{2}\hbar\omega \qquad (۲۱-۵)$$

اینک مشاهده می‌کنیم که انرژی به‌حاصل‌جمع این اعداد صحیح بستگی دارد و تمام مجموعه‌های اعداد کوانتومی که حاصل‌جمع آنها یکسان باشند حالتهای یک انرژی را بیان می‌دارند . بنابراین مثلاً ، در حالی که ψ_{000} ناتبهگن است ، حالتهای ψ_{100}، ψ_{010} و ψ_{001} به‌طور سه‌گانه تبهگن‌اند . تبهگنی‌تر از $\varepsilon_{\bar{n}}$ ، که در آن $\bar{n} = n_x + n_y + n_z$ ، برابر است با تعداد طرقی که می‌توان سه‌عدد صحیح غیرمنفی انتخاب کرد به‌طوری که حاصل‌جمع آنها $\bar{n}$ شود ، یعنی

$$\text{تبهگنی تراز } \bar{n} \text{ ام} = \tfrac{1}{2}(\bar{n} + 1)(\bar{n} + 2) \qquad (۲۲-۵)$$

نوسانگر همسانگرد $(V = \frac{1}{2}K(x^2 + y^2 + z^2) = \frac{1}{2}Kr^2)$ مثالی از مسئله نیروی مرکزی است (نیرو در امتداد بردار مکانی) و از این‌رو در مختصات قطبی نیز تفکیک‌پذیر است . به‌زودی خواهیم دید که حل مسئله در مختصات کروی منجر به‌مجموعه‌ای از ویژه تابعهای تبهگن می‌شود که با مجموعه (۵-۱۹) متفاوت است ، هرچند طیف انرژی همان طیف است . در زیر نشان خواهیم داد که ویژه تابعهای کروی تبهگن ، حداکثر ترکیبات خطی توابع دکارتی تبهگن‌اند. بنابراین ، وقتی مسئله برای ویژه حالتهای نوسانگر همسانگرد حل می‌شود ، باید بیشتر دقت کنیم که کدام مجموعه حالتها موردنظر است .

۵ ـ مختصات منحنی‌الخط

مسائل مهم فیزیکی زیادی وجود دارند که در آنها معادله شرودینگر در مختصات دکارتی تفکیک نمی‌شود . از مهمترین آنها مسئله پتانسیل کولنی وابسته به‌اتم هیدرژن است که در مختصات کروی و سهموی تفکیک‌پذیر است . ما به‌طور اختصار بعضی جنبه‌های مختصات منحنی‌الخط عام را بررسی می‌کنیم .

یک مجموعه مختصات توسط تبدیل

$$q_i = q_i(x, y, z) \qquad (i = 1, 2, 3, \ldots)$$

تعریف می‌شود . اگر مربع یک عنصر دیفرانسیلی طول فقط جمله‌های dq_i^2 را در بر داشته باشد و نه جمله‌های ضربدری $dq_i\, dq_j$ را ، سیستم مختصات متعامد نامیده می‌شود و می‌توان قرار دارد

$$dl^2 = dx^2 + dy^2 + dz^2 = h_1^2\, dq_1^2 + h_2^2\, dq_2^2 + h_3^2\, dq_3^2 \qquad (۲۳-۵)$$

پارامترهای h_1 ، h_2 و h_3 ضرایب متریک نامیده می‌شوند و هرکدام از آنها تابعی از q_i ها می‌باشند . وقتی h ها تعیین شدند ، لاپلاسی می‌تواند به‌صورت

$$\nabla^2 = \frac{1}{h_1 h_2 h_3}\left\{\frac{\partial}{\partial q_1}\frac{h_2 h_3}{h_1}\frac{\partial}{\partial q_1} + \frac{\partial}{\partial q_2}\frac{h_1 h_3}{h_2}\frac{\partial}{\partial q_2} + \frac{\partial}{\partial q_3}\frac{h_1 h_2}{h_3}\frac{\partial}{\partial q_3}\right\} \qquad (۲۴-۵)$$

بیان شود و عنصر حجم خواهد شد

$$d\tau = dx\, dy\, dz = h_1 h_2 h_3\, dq_1\, dq_2\, dq_3 \qquad (۲۵-۵)$$

تبدیلات به‌مختصات قطبی کروی و قطبی استوانه‌ای ، به‌عنوان مثال (شکل ۵ ــ ۱)، عبارتند از

$$\begin{aligned} x &= r\sin\theta\cos\phi \\ y &= r\sin\theta\sin\phi \\ z &= r\cos\theta \end{aligned} \qquad \text{و} \qquad \begin{aligned} x &= \rho\cos\phi \\ y &= \rho\sin\phi \\ z &= z. \end{aligned} \qquad (۲۶-۵)$$

یک محاسبه ساده با استفاده از (۵ــ۲۳) و (۵ــ۲۶) نتیجه می‌دهد

$$\begin{aligned} h_r &= 1 \\ h_\theta &= r \\ h_\phi &= r\sin\theta \end{aligned} \qquad \text{و} \qquad \begin{aligned} h_\rho &= 1 \\ h_\phi &= \rho \\ h_z &= 1 \end{aligned}$$

و لاپلاسی‌ها و عناصر حجم به‌ترتیب عبارت خواهند بود از

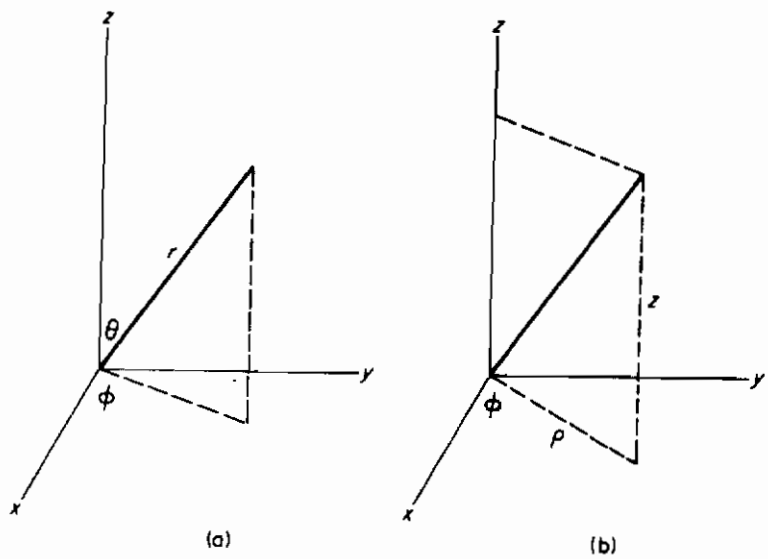
$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2 \sin\theta}\left\{\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \sin\theta \frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{\partial}{\partial\phi}\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\right\}$$

$$d\mathbf{r} = r^2 \sin\theta \, dr \, d\theta \, d\phi$$

و

$$\nabla^2 = \frac{1}{\rho}\left\{\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\right) + \frac{\partial}{\partial\phi}\left(\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\phi}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\rho\frac{\partial}{\partial z}\right)\right\}$$

$$d\mathbf{r} = \rho \, d\rho \, d\phi \, dz$$



شکل (۵ــ۱) معنی هندسی متغیرهای (الف) قطبی‌کروی (r, θ, ϕ) و (ب) قطبی استوانه‌ای (ρ, ϕ, z)

دستگاههای مختصات منحنی‌الخط متعامد زیادی وجود دارند و یک مسئله معین ممکن است در بیش از یک دستگاه تفکیک‌پذیر باشد*. مسئله نیروی مرکزی، همان‌طور که در زیر خواهیم دید، همیشه در مختصات قطبی کروی تفکیک‌پذیر است.

---

* به‌عنوان مثال به‌مرجع زیر رجوع کنید

P.M. Morse and H. Feshbach, " Methods of Theoretical physics," Volume I, P. 655. Mc Graw-Hill, New-York,1953.

۶ ـ مسئله نیروی مرکزی $V = V(r)$

معادله شرودینگر برای ذره‌ای که توسط یک پتانسیل نیروی مرکزی مقید شده است در مختصات کروی عبارت است از

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\left(\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)\right\}+V(r)\right]$$
$$\times\psi_i(r,\theta,\phi)=\varepsilon_i\psi_i(r,\theta,\phi). \qquad (۲۷-۵)$$

علاوه بر شرط معمولی حالت مقید، $\psi \xrightarrow[r\to\infty]{} 0$، باید تک مقداری‌بودن را نیز تحمیل کنیم، یعنی،

$$\psi_i(r,\theta,\phi)=\psi_i(r,\theta,\phi+2\pi)$$

زیرا نقاط ϕ و $\phi+2\pi$ در واقع یک نقطه فیزیکی هستند.

جواب آزمایشی $\psi_l = R(r)Y(\theta,\phi)$ را در (۵ـ۲۷) قرار می‌دهیم و پس از ساده کردن خواهیم داشت

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)\right\}+(\varepsilon_i-V(r))r^2$$
$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{Y}\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\right\} \qquad (۲۸-۵)$$

چون متغیر r در یکطرف و متغیرهای θ و ϕ در طرف دیگر قرار دارند، (۵ـ۲۸) فقط در صورتی می‌تواند برای تمام مقادیر r، θ و ϕ برقرار باشد که هرکدام از طرفین برابر با مقدار ثابتی باشد. با انتخاب این ثابت* به‌شکل $(\hbar^2/2m)l(l+1)$، دو معادله

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right)+V(r)+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\right\}R(r)=\varepsilon_l R(r) \qquad (۲۹-۵)$$

و

---

* این انتخاب برای ثابت تفکیک به‌معادلاتی منجر می‌شود که برای متخصصین ریاضی فیزیک آشناست و لذا بررسی آنها آسانتر است.

$$-\hbar^2\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right\}Y=\hbar^2 l(l+1)Y \qquad (۳۰-۵)$$

را به‌دست خواهیم آورد .

به‌زودی به‌مفهوم فیزیکی این معادلات باز خواهیم گشت . نخست با فرض اینکه Y به‌شکل

$$Y=\Theta(\theta)\Phi(\phi)$$

باشد فرایند تفکیک را ادامه می‌دهیم . در این صورت معادله (۵ ــ ۳۰) خواهد شد

$$\hbar^2\left\{\left[\frac{\sin\theta}{\Theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)\right]+l(l+1)\sin^2\theta\right\}=-\hbar^2\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} \qquad (۳۱-۵)$$

مانند حالت قبل ، این معادله فقط در صورتی برقرار است که هردو طرف آن برابر با یک عدد ثابت باشند . با انتخاب این ثابت تفکیک* به‌شکل $\hbar^2 m_l^2$ ، معادلات دیفرانسیل معمولی

$$-\hbar^2\frac{d^2}{d\phi^2}\Phi_{m_l}=m_l^2\hbar^2\Phi_{m_l} \qquad (۳۲-۵)$$

و

$$\hbar^2\left\{\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta_{lm_l}}{d\theta}\right)\right]+\left[l(l+1)-\frac{m_l^2}{\sin^2\theta}\right]\Theta_{lm_l}\right\}=0 \qquad (۳۳-۵)$$

را به‌دست‌خواهیم‌آورد . درنتیجه ، معادله‌شرودینگرکاملا" به (۵ــ۲۹) ، (۵ــ۳۲)و (۵ــ۳۳) که به‌ترتیب معادلات دیفرانسیل معمولی از متغیرهای r ، ϕ و θ هستند ، تفکیک می‌شود . لذا جواب کلی به‌صورت زیر در می‌آید

$$\psi_{lm_l}=R(r)Y_{lm_l}(\theta,\phi)=R(r)\Theta_{lm_l}(\theta)\Phi_{m_l}(\phi)$$

اینک به‌مسئله انتساب مفهوم فیزیکی به‌معادلات زاویه‌ای و ثابتهای تفکیک می‌پردازیم .

---

* پانوشت صفحه ۱۶۵ را به‌بینید .

توجه کنیم که در معادلات (۵ــ۳۰)، (۵ــ۳۲) و (۵ــ۳۳) فقط متغیرهای زاویه‌ای دخالت می‌کنند. بخصوص چون $V(r)$ در آنها ظاهر نمی‌شود، این معادلات در تمام مسائل نیروی مرکزی مشترک‌اند. می‌توان تحقیق کرد که طرف چپ (۵ــ۳۰) در واقع همان عملگر $\hat{L}^2$ است. با به‌کاربردن تبدیل از مختصات دکارتی به‌مختصات قطبی‌کروی و قاعده‌زنجیره‌ای مشتق‌گیری، نتیجه خواهیم گرفت

$$\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y = \frac{\hbar}{i}\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right) = i\hbar\left(\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$$

$$\hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z = \frac{\hbar}{i}\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right) = i\hbar\left(-\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$$

$$\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi} \qquad (۳۴-۵)$$

با انجام عملیات لازم، نتیجه می‌شود

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]$$

چون در (۵ــ۳۰) فقط مشتقات زاویه‌ای دخالت می‌کنند، واردکردن $R(r)$ در دوطرف این معادله‌تغییری در آن ایجاد نمی‌کند و لذا خواهیم داشت

$$\hat{L}^2 R Y_{lm_l} = \hbar^2 l(l+1) R Y_{lm_l}$$

یا

$$\hat{L}^2\psi_{lm_l} = \hbar^2 l(l+1)\psi_{lm_l} \qquad (۳۵-۵)$$

به‌علاوه، چون

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

نتیجه می‌شود که (۵ــ۳۲) عبارت است از

$$\hat{L}_z^2\Phi_{m_l} = m_l^2\hbar^2\Phi_{m_l}$$

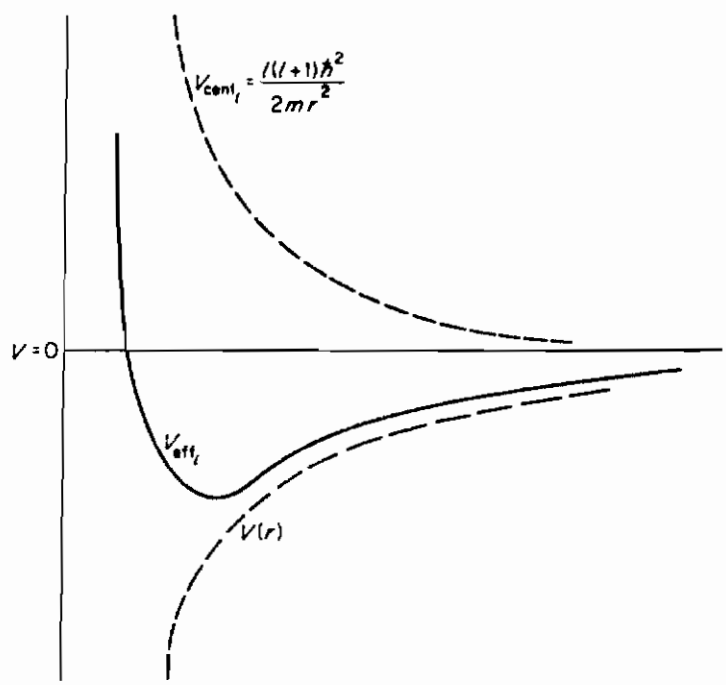
یا ، با ضرب‌کردن دو طرف در $R\Theta_{lm_l}$ ،

$$\hat{L}_z^2\psi_{lm_l} = m_l^2\hbar^2\psi_{lm_l} \qquad (۳۶-۵)$$

بدین‌ترتیب به‌نتیجه زیر می‌رسیم : **فرایند تفکیک متغیرهای هرمسئله نیروی مرکزی در مختصات کروی همیشه منجر به‌ویژه تابعهائی از انرژی می‌شود که به‌طور همزمان ویژه تابعهای $\hat{L}^2$ و $\hat{L}_z^2$ نیز هستند** . ویژه مقدارها به‌ترتیب عبارت‌انداز $l(l+1)\hbar^2$ و $m_l^2\hbar^2$ که در آنها l و m_l باید تعیین شوند .

با بازگشت به‌معادله شعاعی مشاهده می‌کنیم که این معادله با یک معادله شرودینگر یک‌بعدی (جهت شعاعی) که پتانسیل موءثر آن برابر با پتانسیل ناشی از نیروی مرکزی به‌اضافه یک پتانسیل‌گریزاز مرکز (دافعه) وابسته به‌تکانه زاویه‌ای (شکل ۵ــ۲) می‌باشد هم‌ارز است ، یعنی ،

$$V_{\mathrm{eff}_l}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \qquad (۳۷-۵)$$



شکل (۵ــ۲) پتانسیلهای موءثر شعاعی (V_{eff_l}) و گریزاز مرکز (V_{cent_l}) ونیروی مرکزی $(V(r))$.

جمله اول در (۵–۲۹) می‌تواند به‌عنوان انرژی جنبشی شعاعی* درنظر گرفته شود .

$$\frac{\hat{p}_r^{\,2}}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right) \qquad (۳۸-۵)$$

چون در همه مسائل نیروی مرکزی (۵–۳۲) و (۵–۳۳) به‌طور مشترک وجود دارند ، بهتراست نخست حل آنها را مورد مطالعه قرار دهیم . با این کار ما عملاً" تکانه زاویه‌ای‌را کوانتیده کرده‌ایم . امکان اینکه هامیلتونی نیروی مرکزی دارای ویژه حالتهای مشترک با $\hat{L}^2$ و $\hat{L}_z$ باشد می‌توانست از روابط جابه‌جایی

$$[\mathscr{H}_{cf}, \hat{L}^2] = [\mathscr{H}_{cf}, \hat{L}_z] = 0 \qquad (۳۹-۵)$$

پیش‌بینی شود . تحقیق این روابط به‌عنوان تمرین واگذار می‌شود .

۷ ــ کوانتش تکانهٔ زاویه‌ای

دیدیم که تفکیک متغیرهای یک مسئله نیروی مرکزی در مختصات کروی همیشه منجر به‌معادله زاویه‌ای

$$-\hbar^2\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right\}Y_{lm_l}(\theta,\phi) = \hbar^2 l(l+1)Y_{lm_l}(\theta,\phi) \qquad (۴۰-۵)$$

---

* توجه کنید که

$$\hat{p}_r = \left(\frac{\hat{\mathbf{r}}}{\hat{r}}\right)\cdot\hat{\mathbf{p}} \to \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial r}$$

هرمیتی نیست زیرا از حاصلضرب عملگرهای هرمیتی‌ای که جابه‌جاپذیر نیستند به‌دست آمده است ، یک نمایش قابل قبول برای $\hat{p}_r$ شکل هرمیتی (به‌مسئله ۵–۱۳ مراجعه کنید)

$$\hat{p}_r = \frac{1}{2}\left[\left(\frac{\hat{\mathbf{r}}}{\hat{r}}\right)\cdot\mathbf{p}+\mathbf{p}\cdot\left(\frac{\hat{\mathbf{r}}}{\hat{r}}\right)\right] \to \frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial}{\partial r}-\frac{1}{r}\right)$$

است که از آن نتیجه می‌شود

$$\frac{\hat{p}_r^{\,2}}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)$$

می‌شود که پس از یک تفکیک دیگر، $Y_{lm} = \Theta_{lm_l}(\theta)\Phi_{m_l}(\phi)$ ، منجر می‌شود به

$$\sin\theta \frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta \frac{d\Theta_{lm_l}}{d\theta}\right) + (-m_l^2 + l(l+1)\sin^2\theta)\Theta_{lm_l} = 0 \qquad (۴۱-۵)$$

و

$$-\hbar^2 \frac{d^2}{d\phi^2}\Phi_{m_l} = m_l^2\hbar^2\Phi_{m_l} \qquad (۴۲-۵)$$

بعلاوه، (۵ـ۴۰) و (۵ـ۴۲) معرف معادلات ویژه مقداری برای $\hat{L}^2$ و $\hat{L}_z$ (یا دقیقتر بگوئیم $\hat{L}_z^2$) بااعدادکوانتومی l (موسوم به‌مداری) و m_l (موسوم به‌سمتی‌یا "مغناطیسی")می‌باشند. وقتی‌که مقادیرمجاز l و m_l تعیین شدند، ویژه مقدارهای $\hat{L}^2$ و $\hat{L}_z$ می‌توانند به‌ترتیب به‌صورت $l(l+1)\hbar^2$ و $m_l\hbar$ نوشته شوند.

مشاهده می‌کنیم که هرجواب

$$\hat{L}_z\Phi_{m_l} = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{d\phi}\Phi_{m_l} = m_l\hbar\Phi_{m_l} \qquad (۴۳-۵)$$

خود به‌خود جواب (۵ـ۴۲) نیز هست. جواب (۵ـ۴۳) ویژه تابعهای $\hat{L}_z$ را به‌صورت $\Phi_{m_l} \propto e^{im_l\phi}$ ، به‌دست می‌دهد. اما تک مقداری‌بودن ψ ایجاب می‌کند که

$$\Phi_{m_l}(\phi + 2\pi) = \Phi_{m_l}(\phi)$$
$$e^{im_l(\phi+2\pi)} = e^{im_l\phi}$$

یا

$$e^{im_l 2\pi} = 1$$

که‌ازآن‌نتیجه‌می‌شود $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$. لذاویژه‌مقدارهای $\hat{L}_z$ عبارتنداز $0, \pm\hbar, \pm 2\hbar, \ldots$.

سپس توجه خود را به (۵ـ۴۱) معطوف می‌کنیم که، با استفاده‌از $u = \cos\theta$ ، می‌تواند به

$$\frac{d}{du}\left[(1-u^2)\frac{d}{du}\Theta_{lm_l}(u)\right] + \left(l(l+1) - \frac{m_l^2}{1-u^2}\right)\Theta_{lm_l}(u) = 0 \qquad (۴۴-۵)$$

تبدیل شود. معادله (۵ـ۴۴) معادله وابسته لوژاندر است و جوابهای آن عبارتنداز توابع

وابسته لوژاندر . جایگذاری

$$\Theta_{lm_l} = (1-u^2)^{|m_l|/2} \frac{d^{|m_l|}}{du^{|m_l|}} P_l(u) \qquad (۴۵-۵)$$

در (۵ـ۴۴) آنرا به‌معادله معمولی (مستقل از m_l) لوژاندر تبدیل می‌کند

$$\frac{d}{du}\left[(1-u^2)\frac{dP_l(u)}{du}\right] + l(l+1)P_l(u) = 0 \qquad (۴۶-۵)$$

که در آن P_l توابع لوژاندر معمولی هستند . **معادله(۵ـ۴۶) باید با شرط متناهی‌بودن ویژه تابعها حل شود .**

بنابراین ، انتظار داریم

$$P_l(u) = \text{متناهی} \quad , \quad -1 \leqslant u \leqslant 1 \quad (0 \leqslant \theta \leqslant \pi) \quad \text{برای}$$

روش به‌کاربرده شده در اینجا کاملا" شبیه به‌روش حل معادله هرمیت مربوط به‌ویژه تابعهای نوسانگر است . جواب معادله را به‌صورت سری

$$P_l(u) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j u^j$$

در نظر می‌گیریم که پس از جایگذاری در (۵ـ۴۶) معادله بازگشتی دوجمله‌ای

$$a_{j+2} = \frac{j(j+1) - l(l+1)}{(j+1)(j+2)} a_j \qquad (۴۷-۵)$$

را به‌دست می‌دهد . دوباره با انتخاب دلخواه a_0 و a_1 یک سری زوج یا فرد ایجاد می‌کنیم. متاسفانه ،همان‌طورکه می‌توان تحقیق کرد ،در $u = \pm 1$ هردو جواب سری مانند واگرامی‌شوند و این واگرائی آنها را به‌عنوان ویژه تابع غیرقابل قبول می‌کند . اما اگر l یک عدد صحیح مثبت یا صفر باشد ، در این صورت یا سری زوج یا سری فرد (بسته به‌مقدار l)قطع می‌شود . برای l زوج ، یک چندجمله‌ای زوج از درجه l به‌دست خواهیم آورد . هم‌چنین ،وقتی l فرد باشد یک چندجمله‌ای فرد از درجه l به‌دست خواهد آمد . **چون چندجمله‌ایها در $u = \pm 1$ متناهی می‌مانند ویژه تابعهای قابل قبولی هستند .**

به‌طور قراردادی $a_0^{(l)}$ و $a_1^{(l)}$ را طوری انتخاب می‌کنند که $P_l(1) \equiv 1$ باشد ،دراین‌صورت

چندجمله‌ایها چندجمله‌ایهای لوژاندر هستند . چندتای اول آنها عبارتنداز

$$P_0(u) = 1 \qquad P_3(u) = \tfrac{1}{2}(5u^3 - 3u)$$
$$P_1(u) = u \qquad P_4(u) = \tfrac{1}{8}(35u^4 - 30u^2 + 3)$$
$$P_2(u) = \tfrac{1}{2}(3u^2 - 1) \qquad P_5(u) = \tfrac{1}{8}(63u^5 - 70u^3 + 15u) \qquad (۴۸-۵)$$

چندجمله‌ایهای (معمولی) لوژاندر دارای خواص مفید زیراند

(۱) $$(1 - 2uz + z^2)^{-1/2} = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(u) z^l$$ (تابع مولد)

(۲) $$P_l(u) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{du^l} (u^2 - 1)^l$$ (فرمول رودریگز)

(۳) $$(l + 1)P_{l+1}(u) - (2l + 1)uP_l(u) + lP_{l-1}(u) = 0$$

(۴) $$(u^2 - 1)P_l'(u) = luP_l(u) - lP_{l-1}(u)$$

(۵) $$\int_{-1}^{1} P_l(u)P_{l'}(u)\, du = \frac{2}{2l + 1} \delta_{ll'}$$ (تعامد) (۴۹-۵)

با استفاده از (۵-۴۵) ، توابع وابسته لوژاندر* خواهند شد

$$\Theta_{lm_l} = P_l^{m_l} = (1 - u^2)^{|m_l|/2} \frac{d^{|m_l|}}{du^{|m_l|}} P_l(u) \qquad (۵۰-۵)$$

توابع وابسته دارای خاصیت راست هنجاری

$$\int_{-1}^{1} P_{l'}^{m_l}(u)P_l^{m_l}(u)\, du = \frac{2}{2l + 1} \frac{(l + |m_l|)!}{(l - |m_l|)!} \delta_{ll'}$$

هستند . چون مشتق $|m_l|$ام یک چند جمله‌ای از درجه l بجز برای $m \leqslant l$ صفر است ، از (۵-۵۰) نتیجه می‌شود که یک ویژه تابع فقط وقتی وجود خواهد داشت که عدد مغناطیسی از شاخص مداری تجاوز نکند**.

هماهنگ‌های کروی (بهنجارشده) به‌صورت

---

* به‌خاطر عامل $(1 - u^2)^{|m_l|/2}$ ، توابع Θ_{lm_l} چند جمله‌ای نیستند

** این محدودیت متناظر با این شرط کلاسیکی است که هرمؤلفهٔ یک بردار (L_z) نمیتواند از اندازه خود بردار (L) بزرگتر باشد .

$$Y_{lm_l}(\theta, \phi) = \left[\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-|m_l|)!}{(l+|m_l|)!}\right]^{1/2} P_l^{m_l}(u = \cos\theta)e^{im_l\phi} \qquad (۵۱-۵)$$

تعریف شده‌اند که در آنها $l = 0, 1, 2, \ldots$ و $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$. این هماهنگ‌ها ویژه تابعهای $\hat{L}^2$ و $\hat{L}_z$ با ویژه مقدارهای $l(l+1)\hbar^2$ و $m_l\hbar$ هستند و دارای خاصیت بهنجارش زیراند

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} Y^*_{lm_l}(\theta, \phi)Y_{l'm_l'}(\theta, \phi)\sin\theta\, d\theta\, d\phi = \delta_{ll'}\,\delta_{m_lm_l'} \qquad (۵۲-۵)$$

ویژه تابع کلی هرمسئله نیروی مرکزی به‌صورت زیر در می‌آید

$$\psi_{nlm_l} = R_{nl}(r)Y_{lm_l}(\theta, \phi) \qquad (۵۳-۵)$$

دراینجا یک عدد کوانتومی سومی، n ، وارد کرده‌ایم که مفهوم آنرا هنوزمشخص نکرده‌ایم. بنابراین، ویژه تابعهائی که بدین‌طریق ایجاد شده‌اند به‌طور همزمان هم ویژه تابعهای هامیلتونی نیروی مرکزی، $\mathscr{H}_{cf}$ ، هستند و هم ویژه تابعهای عملگرهای $\hat{L}^2$ و $\hat{L}_z$. در این مرحله خواننده ممکن است سئوال کند که، در حالی که $\mathscr{H}_{cf}$ با $\hat{L}_x$ و $\hat{L}_y$ نیز جابه‌جاپذیر است، پس چرا فقط ویژه تابع $\hat{L}_z$ ظاهرشده‌است؟ به‌طورمعادل، در مسئله‌ای‌که تقارن کروی دارد، محور z چه ویژگی خاصی دارد؟ جواب این است که این ریاضی است، و نه فیزیک که محور z را ممتاز کرده است. با نگاهی به‌تبدیل به‌مختصات کروی (۵ ــ ۲۶)، مشاهده می‌کنیم که زاویه θ به‌وسیله میل نسبت به‌محور z تعریف شده است. اگر دقیقتر بگوئیم، ویژه تابع ψ_{nlm_l} ویژه تابع $\hat{L}^2$ و یکی از مولفه‌های $\hat{\mathbf{L}}$ روی هر امتدادی در فضا است. برای سهولت ریاضی این امتداد به‌عنوان محور z در نظر گرفته می‌شود.

از رابطه‌کروشه پواسن (۲ــ۲۸)نتیجه می‌شود که رابطه جابه‌جائی برای مولفه‌های تکانه زاویه‌ای باید به‌صورت زیر باشند

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\hat{\mathbf{L}}_k \quad , \quad i, j, k = x, y, z \quad \text{(در یک ترتیب چرخه‌ای)} \qquad (۵۴-۵)$$

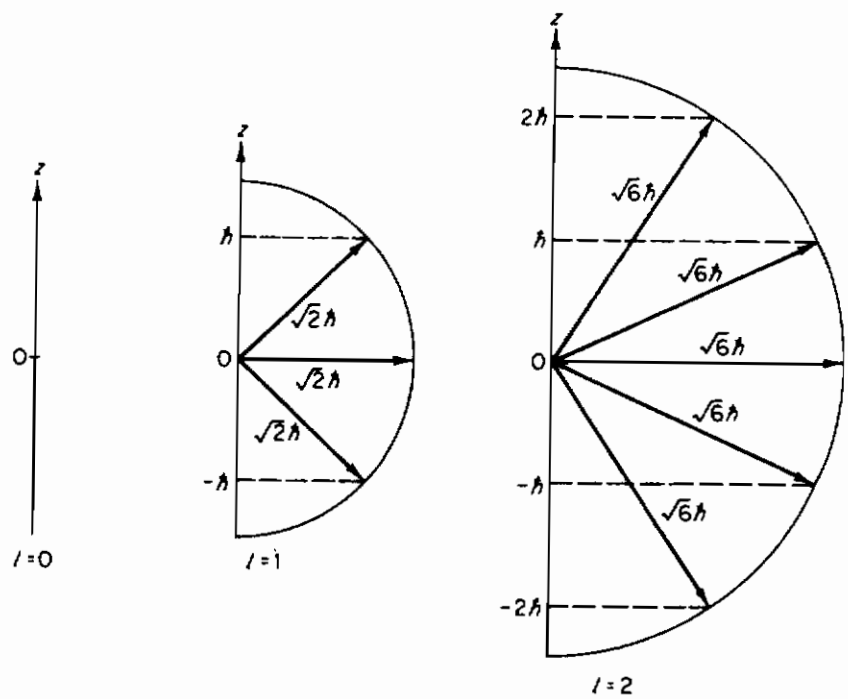
ناسازگاری هردومولفه‌ای از $\hat{\mathbf{L}}$ روشن می‌کند که چرا فقط ویژه تابعهای یکی از مولفه‌های آن می‌توانند به‌طور همزمان با $\hat{L}^2$ و $\mathscr{H}_{cf}$ کوانتیده شوند. بااینکه $\mathscr{H}_{cf}$ با $\hat{L}_x$ ، $\hat{L}_y$ و $\hat{L}_z$ جابه‌جا پذیر است، مولفه‌های $\hat{\mathbf{L}}$ بین خودشان جابه‌جاپذیر نیستند.

ویژه تابعهای نیروی مرکزی ، $\psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi)$ ، متناظر با ویژه کتهایی با خواص‌زیراند

$$\mathscr{H}|n, l, m_l\rangle = \varepsilon_{nl}|n, l, m_l\rangle$$
$$\hat{L}^2|n, l, m_l\rangle = l(l+1)\hbar^2|n, l, m_l\rangle \qquad (l = 0, 1, 2, \ldots) \qquad (۵۵-۵)$$

و

$$\hat{L}_z|n, l, m_l\rangle = m_l\hbar|n, l, m_l\rangle \qquad (m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm l)$$



شکل (۵-۳) کوانتش L و L_z . توجه کنید که بردار $\mathbf{L}$ هرگز برمحور z منطبق نمی‌شود .

معادله شعاعی (۵-۲۹) شامل m_l نیست ، در نتیجه ویژه مقدارهای انرژی حداکثر به‌اعداد کوانتومی n و l بستگی دارند . بنابراین ، یک تبهگنی "جهتی" یا فضائی‌نسبت به‌حالتهای کوانتومی مغناطیسی خواهیم داشت . این تبهگنی جهتی ترازهای ε_{nl} حداقل از مرتبه $2l+1$ است (زیرا برای یک m_l معین این تعداد l وجود دارد) و می‌تواند به‌تقارن‌کروی پتانسیل (شکل ۵-۳) نسبت داده شود . نتیجه می‌شود که هر ترکیب خطی از زیر حالتهای مغناطیسی یک ویژه حالت $\mathscr{H}$ و $\hat{L}^2$ نیز هست ، یعنی

$$|n, l\rangle' = \sum_{m_l=-l}^{l} a_{m_l}|n, l, m_l\rangle$$

یا

$$\psi'_{nl} = \sum_{m_l=-l}^{l} a_{m_l}\psi_{nlm_l}$$

اما ، چون مقادیر m_l را "مخلوط" کرده‌ایم ، ویژه حالتهای جدید دیگر ویژه حالتهای $\hat{L}_z$ نیستند .

عدد کوانتومی سوم یا اصلی n (و در نتیجه ε_{nl}) باید به‌وسیله معادله شعاعی برای مسئله نیروی مرکزی خاص تعیین شود . به‌عنوان چند مثال ، ذره آزاد ، نوسانگر همسانگرد و مسئله کولنی‌را بررسی می‌کنیم .

۸ ــ ذره آزاد (مختصات کروی)

ویژه تابع ذره‌آزاد درمختصات دکارتی به‌دست‌آورده شد و نشان داده شدکه به‌صورت $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$است . اینک ویژه تابعهای ذره آزاد در مختصات کروی را درنظر خواهیم گرفت.معادله موج (۵ــ۲۷) باید با $V(r) = 0$ حل شود . برای هر ویژه حالت انرژی سه‌عدد کوانتومی k ، l و m_l وجود دارد .جواب باید به‌صورت $\psi_{klm_l} = R_{kl}(r)\,Y_{lm_l}(\theta, \phi)$ باشد ، که درآن پارامتر کوانتومی پیوسته k به‌جای n به‌کار رفته است . معادله شعاعی (۵ــ۲۹) برای ذره آزاد $(V = 0)$ خواهد شد

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR_{kl}}{dr}\right) + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]R_{kl} = 0 \qquad (۵۶-۵)$$

که درآن $k^2 = 2m\varepsilon_k/\hbar^2$. با استفاده از تغییر متغیر $\rho = kr$ ، معادله فوق به‌صورت معادله بسل کروی

$$\frac{1}{\rho^2}\frac{d}{d\rho}\left(\rho^2\frac{dR_l(\rho)}{d\rho}\right) + \left(1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)R_l(\rho) = 0 \qquad (۵۷-۵)$$

با جواب عمومی

$$R_l(kr) = A_l j_l(kr) + B_l n_l(kr)$$

در می‌آید که j_l و n_l به‌ترتیب توابع بسل کروی* و نیومن[1] کروی مرتبه l نامیده می‌شوند. مجددا" می‌خواهیم که ψ در همه‌جا متناهی باشد. توابع نیومن دارای ویژگی $n_l(kr) \xrightarrow[r\to 0]{} \infty$ هستند و بنابراین جوابهای قابل قبولی برای مسئله ما نیستند. در نتیجه ویژه تابعها و ویژه مقدارهای ذره آزاد به‌صورت

$$\psi_{klm_l} = j_l(kr)Y_{lm_l}(\theta, \phi) \qquad (۵۸-۵)$$

و $\varepsilon_k = \hbar^2k^2/2m$ در می‌آیند. توجه کنیم که انرژی فقط به‌پارامتر اصلی k بستگی‌دارد، و در نتیجه تبهگنی شامل l و m_l است. باید این امکان وجود داشته باشد که ترکیبات خطی حالتهای مربوط به‌یک k ولی با l ها و m_l های متفاوت را تشکیل داد و به‌جواب دکارتی که قبلا" به‌دست آمد رسید، یعنی

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m_l=-l}^{l} a_{lm_l}(k) j_l(kr) Y_{lm_l}(\theta, \phi) \qquad , \qquad |\mathbf{k}| = k$$

برای حالت خاصی که در آن $\mathbf{k}$ در امتداد محور z قرار دارد، می‌توان ضرایب را طوری حساب کرد که داشته باشیم

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos\theta) \qquad (۵۹-۵)$$

ویژه تابعهای کروی ذره آزاد به‌طور همزمان هم ویژه تابعهای $\hat{L}^2$ هستند و هم ویژه تابعهای $\hat{L}_z$ (به‌جای $\hat{\mathbf{p}}$)، اهمیت دستگاه مختصات به‌کاربرده شده برای به‌دست‌آوردن ویژه‌تابعهای انرژی حالا باید روشن شده باشد.

۹ ــ نوسانگر همسانگرد

معادله شعاعی (۵ ــ ۲۹) برای این مسئله ($V = \frac{1}{2}Kr^2 = \frac{1}{2}m\omega^2r^2$) به‌صورت

---

* این توابع بسل توسط رابطهٔ زیر به‌توابع بسل استوانه‌ای مربوط‌اند

$$j_l(kr) = \left(\frac{\pi}{2kr}\right)^{1/2} J_{l+1/2}(kr)$$

1- Neumann

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR_{nl}}{dr}\right)+\frac{2m}{\hbar^2}\left(\varepsilon_{nl}-\frac{1}{2}m\omega^2r^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)R_{nl}=0 \qquad (۶۰-۵)$$

درمی‌آید. به‌دست‌آوردن جواب طولانی‌است و تشریح دقیق‌آن روشنگری‌خاصی‌دربرندارد. لذا صرفا" به‌طرح نکات عمده‌روشهای به‌کار برده شده اکتفا خواهیم‌کرد. نخست‌قرارمی‌دهیم $\rho=\alpha r^2$ ، که در آن $\alpha=m\omega/\hbar$ ، و می‌نویسیم

$$R_{nl}=\rho^{(l+1)/2}e^{-\rho/2}\frac{L_n^{l+1/2}}{\rho^{1/2}}$$

سپس انرژی را برابر با $\varepsilon_{nl}=\hbar\omega(2n+l+\frac{3}{2})$ قرارمی‌دهیم. در این صورت (۵—۶۰) به‌صورت معادله ابر هندسی (رک ۵—۶۸)

$$\rho\frac{d^2}{d\rho^2}L_n^{l+1/2}(\rho)+\left[\left(l+\frac{1}{2}\right)+1-\rho\right]\frac{d}{d\rho}L_n^{l+1/2}(\rho)+nL_n^{l+1/2}(\rho)=0 \qquad (۶۱-۵)$$

در می‌آید. جوابها در $r\to\infty$ واگرا می‌شوند مگر اینکه n عدد صحیحی باشد $(n=0,1,2,\ldots)$ که در این صورت جوابهای $L_n^{l+1/2}$ چندجمله‌ایهای لاگر (از مرتبه‌نیمه‌صحیح) خواهند بود. چندتای اول عبارتنداز

$$L_0^{1/2}=1 \qquad L_1^{1/2}=\tfrac{3}{2}-\rho$$
$$L_0^{3/2}=1 \qquad L_1^{3/2}=\tfrac{5}{2}-\rho$$

ویژه تابعها و ویژه مقدارهای نوسانگر* خواهند شد

---

* می‌توان (۵—۶۲) را بر حسب $\bar{n}$ ، به‌صورت زیر بیان کرد

$$\psi_{\bar{n}lm}=r^le^{-\alpha r^2/2}L_{(\bar{n}-l)/2}^{l+1/2}(\alpha r^2)Y_{lm}(\theta,\phi) \qquad , \qquad \varepsilon_{\bar{n}}=(\bar{n}+\tfrac{3}{2})\hbar\omega$$

در این شکل به‌وضوح دیده می‌شود که انرژی به‌عدد کوانتومی $\bar{n}$ بستگی دارد و نه به l. چنین اتفاقی برای یک مساله نیروی مرکزی به‌عنوان تبهگنی "تصادفی" نامیده می‌شودو از تقارن خاصی غیر از تقارن کروی پتانسیل ناشی می‌شود. این تقارن معمولا" از این واقعیت نتیجه می‌شود که معادله شرودینگر برای این پتانسیل دردستگاه مختصاتی غیراز مختصات کروی تفکیک‌پذیر است.

$$\psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi) \propto \frac{r^{l+1}e^{-\alpha r^2/2}L_n^{l+1/2}(\alpha r^2)Y_{lm_l}(\theta, \phi)}{r} \qquad (۶۲-۵)$$

و

$$\varepsilon_{nl} = \varepsilon_{\bar{n}} = (\bar{n} + \tfrac{3}{2})\hbar\omega \qquad (۶۳-۵)$$

که در آن $\bar{n} = 2n + l = 0, 1, 2, \ldots$. ویژه مقدارها با مقادیری که در مختصات دکارتی به‌دست آمدند در توافق کامل هستند . این دو مجموعه اعداد کوانتومی با رابطه $n_x + n_y + n_z = \bar{n} = 2n + l$ به‌یکدیگر مربوط می‌شوند . از (۵–۶۲) ویژه تابع حالت پایه $(n = l = m_l = 0)$ عبارت است از

$$\psi_{000} \propto e^{-\alpha r^2/2}L_0^{1/2}Y_{00} \propto e^{-\alpha r^2/2} = e^{-\alpha(x^2+y^2+z^2)/2} \qquad (۶۴-۵)$$

وانرژی آن برابراست با $\varepsilon_{000} = \frac{3}{2}\hbar\omega$. این حالت ناتبهگن ویکتاست وبنابراین (به‌استثنای بهنجارش) با نتیجه دکارتی (۵–۱۹) یکسان است .

اولین حالت برانگیخته $(n = 0, l = 1)$ به‌طور سه‌گانه تبهگن است و انرژی وابسته به هرسه تابع ψ_{011} ، ψ_{010} و ψ_{01-1} یکسان و برابر با $\frac{5}{2}\hbar\omega$ است . در اینجا نیز باید بتوان‌از ویژه تابعهای کروی حالتهای دکارتی تبهگن را ساخت . اتفاقاً $\psi_{010}(r, \theta, \phi)$ و $\psi_{001}(x, y, z)$ یکسان هستند ، یعنی

$$\psi_{010}(r, \theta, \phi) = e^{-\alpha r^2/2}r\cos\theta = e^{-\alpha(x^2+y^2+z^2)/2}z = \psi_{001}(x, y, z)$$

از طرف دیگر ، نتیجه می‌گیریم که ، همان‌طور که می‌توان از رابطه زیر دید ، $\psi_{100}(x, y, z)$ یک ترکیب خطی از $\psi_{011}(r, \theta, \phi)$ و $\psi_{01-1}(r, \theta, \phi)$ است

$$\begin{aligned}\psi_{100}(x, y, z) = e^{-\alpha(x^2+y^2+z^2)/2}x &= e^{-\alpha r^2/2}r\sin\theta\cos\phi \\ &= e^{-\alpha r^2/2}\sin\theta\,\tfrac{1}{2}(e^{i\phi} + e^{-i\phi}) \\ &= \tfrac{1}{2}[\psi_{011}(r, \theta, \phi) + \psi_{01-1}(r, \theta, \phi])\end{aligned}$$

محاسبه مشابهی نشان می‌دهد که

$$\psi_{010}(x, y, z) = \frac{1}{2i}[\psi_{011}(r, \theta, \phi) - \psi_{01-1}(r, \theta, \phi)]$$

در حالی که‌ویژه تابعها و اعداد کوانتومی با سیستم مختصات تغییر می‌کنند ، ویـــژه مقدارهای انرژی و تبهگنی یک تراز همیشه یکی هستند . ارتباط بین ویژه تابعهای کـــروی و دکارتی وابسته به‌یک نوسانگر در جدول (۵–۱) خلاصه شده‌اند

جدول (۵–۱)

طبقه‌بندی چند حالت اول نوسانگر

حالت	انرژی	ویژه تابع دکارتی	ویژه تابع کروی	تبهگنی
$\bar{n} = 2n + l$ $\bar{n} = n_x + n_y + n_z$	$\varepsilon_n = (\bar{n} + \frac{3}{2})\hbar\omega$	$\psi_{n_x n_y n_z}$	ψ_{nlm_l}	$\frac{1}{2}(\bar{n} + 1)(\bar{n} + 2)$
$\bar{n} = 0$ حالت پایه	$\frac{3}{2}\hbar\omega$	ψ_{000}	ψ_{000}	1
$\bar{n} = 1$ اولین حالت برانگیخته	$\frac{5}{2}\hbar\omega$	$\psi_{100}, \psi_{010}, \psi_{001}$	$\psi_{011}, \psi_{01-1}, \psi_{010}$	3
$\bar{n} = 2$ دومین حالت برانگیخته	$\frac{7}{2}\hbar\omega$	$\psi_{110}, \psi_{101}, \psi_{011}$ $\psi_{200}, \psi_{020}, \psi_{002}$	$\psi_{022}, \psi_{02-2}, \psi_{021}$ $\psi_{02-1}, \psi_{020}, \psi_{100}$	6

۱۰ ــ حالتهای مقید یک پتانسیل جاذبه کولنی $(V = -K/r)$

مسئله‌کولنی شاید مهمترین مثالی از یک مسئله نیروی مرکزی باشد که ما بررسی‌خواهیم کرد .الکترون هیدرژنی تحت تأثیر پتانسیلی از این نوع که ناشی از حضور پروتون‌در هسته است قرار دارد . بنابراین حل این مسئله توصیف نسبتا" دقیقی از رفتار ساده‌ترین اتمهـــا ارائه می‌دهد ، و با قدری تعمیم چارچوبی برای کل نظریه فیزیک اتمی به‌دست می‌دهـــد . با این وجود ، از بعضی نظرها ، این پتانسیل کولنـــی خاص‌ترین پتانسیلهـــا است . خواهیم دیدکه حالتهای مقیدآن $(\varepsilon < 0)$ ویژه مقدارهایی‌دارندکه مستقل از l می‌باشند .ایـــــن تبهگنی "تصادفی" جالب را ، مثل مورد نوسانگر همسانگرد ، می‌توان به‌یک‌تقارن ذاتی(علاوه برتقارن فضائی)وابسته به‌پتانسیل$1/r$نسبت داد .به‌علاوه ، حالتهای نامقید آن به‌یک مقطـع موثرپراکندگی کوانتومی منجر می‌شوند که با نتیجه کلاسیکی راترفورد یکسان است* و به یک

* مرجع زیر را به‌بینید :

H. Goldstein, "Classical Mechanics," P.84. Addison-wesley, Reading, Massachusetts, 1950.

مقطع موثر کل واگرا منتهی می‌شود . در اینجا بردبلند پتانسیل کولنی مستقیما" مسئول این واگرائی است .

بحث فعلی خود را به‌حالتهای مقید که برای آنها ویژه مقدارهای انرژی گسسته و منفی است($\varepsilon_n < 0$)محدود می‌کنیم . معادله شعاعی برای پتانسیل کولنی (۵ـ۲۹)خواهد شد*

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR_{nl}}{dr}\right)+\frac{2m}{\hbar^2}\left(\varepsilon_n+\frac{K}{r}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)R_{nl}=0 \qquad (۶۵-۵)$$

جوابهایی از این معادله را جستجو می‌کنیم که درشرط مرزی $R_{nl}(r)\xrightarrow[r=\infty]{}0$ صدق کنند . با قرار دادن $\rho = 2\zeta_n r$ ، که در آن $\zeta_n = (-2m\varepsilon_n/\hbar^2)^{1/2}$ و $R_{nl} = y_{nl}(\rho)/\rho$ است ، (۵ـ۶۵) شکل ساده‌تر

$$\left\{\frac{d^2}{d\rho^2}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}+\frac{\gamma_n}{\rho}-\frac{1}{4}\right\}y_{nl}(\rho)=0 \qquad (۶۶-۵)$$

را ، که در آن $\gamma_n = mK/\zeta_n\hbar^2$ است ، می‌گیرد .

فرض کنیم یک جواب به‌صورت

$$y_{nl}(\rho)=\rho^{l+1}e^{-\rho/2}F_{nl} \qquad (۶۷-۵)$$

وجود دارد که در آن F یک سری توانی‌ازمتغیر ρ است.باقراردادن (۵ـ۶۷)در (۵ـ۶۶) و ساده‌کردن آن ، **معادله ابر هندسی**

$$\left\{\rho\frac{d^2}{d\rho^2}+(\beta-\rho)\frac{d}{d\rho}-\alpha\right\}F(\alpha|\beta|\rho)=0 \qquad (۶۸-۵)$$

را به‌دست خواهیم آورد که در آن $\alpha = l+1-\gamma_n$ و $\beta = 2(l+1) = 2, 4, 6 \ldots$. جوابهای سری‌مانند $F(\alpha|\beta|\rho)$ که در مبداء خوش‌رفتارند ، **سریهای ابرهندسی نامیده می‌شوند** . با قراردادن $F = \sum_{j=0}^{\infty} a_j(\alpha, \beta)\rho^j$ در (۵ـ۶۸)، یک‌فرمول بازگشتی‌دوجمله‌ای به‌دست می‌آوریم که a_{j+1} را به a_j ربط می‌دهد . با انتخاب $a_0 = 1$ ، بقیه ضرایب a_j می‌توانند محاسبه‌شوند و منجر به

---

* تبهگنی "تصادفی" فرض می‌شود ، $\varepsilon_{nl} = \varepsilon_n$. این فرض با نتایج سازگار است .

$$F(\alpha|\beta|\rho) = 1 + \frac{\alpha}{\beta}\rho + \frac{\alpha(\alpha+1)}{2!\beta(\beta+1)}\rho^2 + \frac{\alpha(\alpha+1)(\alpha+2)}{3!\beta(\beta+1)(\beta+2)}\rho^3 + \cdots$$

به‌عنوان یک جواب خصوصی گردند .

حال می‌توان تحقیق‌کردکه این سری بینهایت دربینهایت واگرا می‌شود و منجربه‌ویژه تابع غیرقابل قبولی می‌گردد . اما برای حالت خاصی که در آن α یک عدد صحیح منفی یا صفر باشد ، سری قطع می‌شود و به‌یک چندجمله‌ای از درجه $q = -\alpha$ تبدیل‌می‌شود و ویژه‌تابع قابل قبولی را نمایش می‌دهد . بنابراین جوابهای قابل قبول وقتی وجود دارند که $q = -\alpha = \gamma_n - (l+1) = 0, 1, 2, \ldots$ باشد . چون l یک عدد صحیح غیرمنفی‌است‌نتیجه می‌شود $\gamma_n = n = 1, 2, 3, \ldots$ به‌اضافه این شرط‌کمکی که $l + 1 \leqslant n$.ویژه‌مقدارهای (منفی) انرژی فورا" به‌صورت

$$\gamma_n{}^2 = n^2 = \frac{m^2K^2}{\zeta_n{}^2\hbar^4} = -\frac{mK^2}{2\hbar^2\varepsilon_n} \qquad (۶۹-۵)$$

یا

$$\varepsilon_n = -\frac{mK^2}{2\hbar^2n^2} \qquad (n = 1, 2, 3, \ldots)$$

به‌دست می‌آیند . معادلهٔ (۵ـ۶۹) منعکس‌کننده تبهگنی تصادفی است . هیچ دلیل قبلی برای پیداشدن این تبهگنی وجود ندارد و از طبیعت ریاضی‌خاص جوابهای قابل قبول ناشی می‌شود . ظاهرا" یک تقارن بالاتر (علاوه بر تقارن کروی) وابسته به‌پتانسیل $1/r$ وجود دارد* .

با قراردادن عدد صحیح $p = \beta - 1 = 2l + 1$ ، معادله ابرهندسی (۵ـ۶۸) به‌صورت معادله وابستهٔ لاگر

$$\left\{\rho\frac{d^2}{d\rho^2} + \left[(p+1) - \rho\right]\frac{d}{d\rho} + q\right\}L_q^p(\rho) = 0 \qquad (۷۰-۵)$$

در می‌آیدکه جوابهای چندجمله‌ای آن عبارتنداز چندجمله‌ایهای لاگر (از مرتبه عددصحیح)

$$L_q^p(\rho) = L_{n-(l+1)}^{2l+1}(\rho)$$

---

* این تقارن به‌این واقعیت مربوط می‌شود که معادله شرودینگر برای یک پتانسیل $1/r$ هم‌در مختصات قطبی‌کروی و هم در مختصات سهموی تفکیک پذیر است .

چندتای اول عبارتند از

$$L_0{}^0 = 1 \qquad L_1{}^0 = 1 - \rho \qquad L_2{}^0 = 1 - 2\rho + \tfrac{1}{2}\rho^2$$
$$L_1{}^1 = 2 - \rho \qquad L_2{}^1 = 3 - 3\rho + \tfrac{1}{2}\rho^2 \qquad (۷۱-۵)$$
$$L_1{}^2 = 3 - \rho \qquad L_2{}^2 = 6 - 4\rho + \tfrac{1}{2}\rho^2$$

چندجمله‌ایهای لاگر دارای خواص زیراند

(۱) $$L_p{}^q(z) = (-1)^q \frac{d^q}{dz^q} L^0_{p+q}(z)$$
$$= \frac{e^z z^{-q}}{p!} \frac{d^p}{dz^p}(z^{p+q}e^{-z}) \qquad (p, q = 0, 1, 2, 3, \ldots)$$ (فرمول رودریگز)

(۲) $$\frac{e^{-zt/(1-t)}}{(1-t)^{q+1}} = \sum_{p=0}^{\infty} t^p L_p{}^q(z)$$ (تابع مولد)

(۳) $$zL_p^{q+1}(z) = (p+q+1)L_p{}^q(z) - (p+1)L^q_{p+1}(z)$$

(۴) $$zL_p^{q+1}(z) = -(p-z)L_p{}^q(z) + (p+q)L^q_{p-1}(z) \qquad (۷۲-۵)$$

(۵) $$\int_0^\infty dz\, z^q e^{-z} L_p{}^q(z) L_r{}^q(z) = \frac{[(p+q)!]^3}{p!}\delta_{pr}$$ (تعامد)

پس از جمع و جورکردن نتایج و بهنجارکردن آنها ، ویژه تابعهای مقید انرژی را برای یک پتانسیل کولنی به‌صورت

$$\psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi) = \left[\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-|m_l|)!}{(l+|m_l|)!}\right]^{1/2} P_l^{m_l}(\cos\theta)e^{im_l\phi}$$
$$\cdot \left[\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}\left(\frac{2}{na}\right)^3\right]^{1/2}\left(\frac{2r}{na}\right)^l e^{-r/na} L^{2l+1}_{n-(l+1)}\left(\frac{2r}{na}\right)$$
$$(n = 1, 2, 3, \ldots; \quad l = 0, 1, 2, \ldots, n-1; \qquad (۷۳-۵)$$
$$m_l = 0, \pm 1, \ldots, \pm l)$$

---

* نتایجی که در اینجا ارائه می‌شود فقط شامل ساختار کلی است . تصحیحات کوچکتر به خاطر اسپین الکترون و حرکت پروتون در فصلهای ۶ و ۱۰ بررسی خواهند شد .

پیدا می‌کنیم که در آن جایگذاری $a = \hbar^2/mK$ را به‌کار برده‌ایم . چند ویژه تابع مقید اول کولنی عبارتنداز

$$\psi_{100} = \left(\frac{1}{\pi a^3}\right)^{1/2} e^{-r/a}$$

$$\psi_{200} = \frac{1}{4}\left(\frac{1}{2\pi a^3}\right)^{1/2}\left(2 - \frac{r}{a}\right) e^{-r/2a}$$

$$\psi_{210} = \frac{1}{4}\left(\frac{1}{2\pi a^3}\right)^{1/2}\left(\frac{r}{a}\right) e^{-r/2a} \cos\theta$$

$$\psi_{21\pm1} = \frac{1}{8}\left(\frac{1}{\pi a^3}\right)^{1/2}\left(\frac{r}{a}\right) e^{-r/2a} \sin\theta\, e^{\pm i\phi}$$

$$\psi_{300} = \frac{1}{81}\left(\frac{1}{3\pi a^3}\right)^{1/2}\left(27 - \frac{18r}{a} + \frac{2r^2}{a^2}\right) e^{-r/3a} \qquad (۷۴-۵)$$

$$\psi_{310} = \frac{1}{81}\left(\frac{2}{\pi a^3}\right)^{1/2}\left(6 - \frac{r}{a}\right)\left(\frac{r}{a}\right) e^{-r/3a} \cos\theta$$

$$\psi_{31\pm1} = \frac{1}{81}\left(\frac{1}{\pi a^3}\right)^{1/2}\left(6 - \frac{r}{a}\right)\left(\frac{r}{a}\right) e^{-r/3a} \sin\theta\, e^{\pm i\phi}$$

$$\psi_{320} = \frac{1}{81}\left(\frac{1}{6\pi a^3}\right)^{1/2}\left(\frac{r}{a}\right)^2 e^{-r/3a}(3\cos^2\theta - 1)$$

$$\psi_{32\pm1} = \frac{1}{81}\left(\frac{1}{\pi a^3}\right)^{1/2}\left(\frac{r}{a}\right)^2 e^{-r/3a} \sin\theta\cos\theta\, e^{\pm i\varphi}$$

$$\psi_{32\pm2} = \frac{1}{162}\left(\frac{1}{\pi a^3}\right)^{1/2}\left(\frac{r}{a}\right)^2 e^{-r/3a} \sin^2\theta\, e^{\pm 2i\phi}$$

۱۱ ــ اتم هیدرژن

نتایج فوق می‌توانند به‌اتم هیدرژن ، که در آن الکترون هیدرژنی در پتانسیل کولنی حاصل از پروتون ساکن در هسته قرار دارد ، اعمال شوند . با قراردادن $K = e^2$ نتیجه می‌گیریم $a = \hbar^2/mK = \hbar^2/me^2$ ، که اولین شعاع بوهر است . ویژه مقدارهای انرژی به‌شکل

$$\varepsilon_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2 n^2} = \frac{\varepsilon_1}{n^2} \qquad (۷۵-۵)$$

در می‌آیند که در آن $\varepsilon_1 = -me^4/2\hbar^2 \simeq -۱۳/۶\ \text{eV}$ در توافق‌کامل با نتایج بوهر است. قابل توجه است که بوهر (۵ــ۷۵) را با یک نظریهٔ بسیار ساده به‌دست آورد.

به‌خاطر تبهگنی تصادفی، n امین تراز به‌تعداد $\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = n^2$ مرتبه تبهگن است. در مواقع لزوم از نمادگذاری طیف نمائی، مذکور در جدول (۵ــ۲)، برای نمایش یک حالت هیدرژنی برحسب مقدار l آن استفاده خواهیم کرد. تبهگنی تصادفی ممکن است با این مورد کلاسیکی که در آن بیضی‌های مختلف (مقادیر مختلف L)، به‌شرط اینکه قطرهای اطول آنها یکسان باشد دارای انرژی یکسانی هستند، مقایسه شود. تبهگنی فضائی‌متناظر با این واقعیت است که صفحه مدار کلاسیکی می‌تواند چرخانده شود بدون اینکه این چرخش روی انرژی آن تاثیری داشته باشد. با اینکه مفهوم یک مدار کاملا" مشخص در مکانیک کوانتومی بیجا و نامناسب است، مجسم‌کردن هرحالت (n, l) به‌وسیله یک مدار مفید است.

جدول (۵ــ۲) نمادگذاری طیف‌نمائی

حرف	مقدار l
s (تیز)	۰
p (اصلی)	۱
d (پخش)	۲
f (اساسی)	۳
g	۴

چون حالتهای $(l = 0)$ دارای تکانه زاویه‌ای صفراند باید به‌صورت بیضی‌های تبهگنی (خطوط مستقیم) نمایش داده شوند. وقتی برای یک n معین l افزایش می‌یابد، انتظار داریم‌که بیضی تبدیل به‌یک شبه دایره شود؛ بنابراین حالتهای n، $l = n - 1$ را به‌صورت دایره‌هایی نمایش می‌دهیم. تمام حالتهای دیگر بیضی‌هایی هستند با خروج از مرکزهای متفاوت و حالتهای با n یکسان دارای قطرهای اطول مساوی هستند (شکل ۵ــ۴).

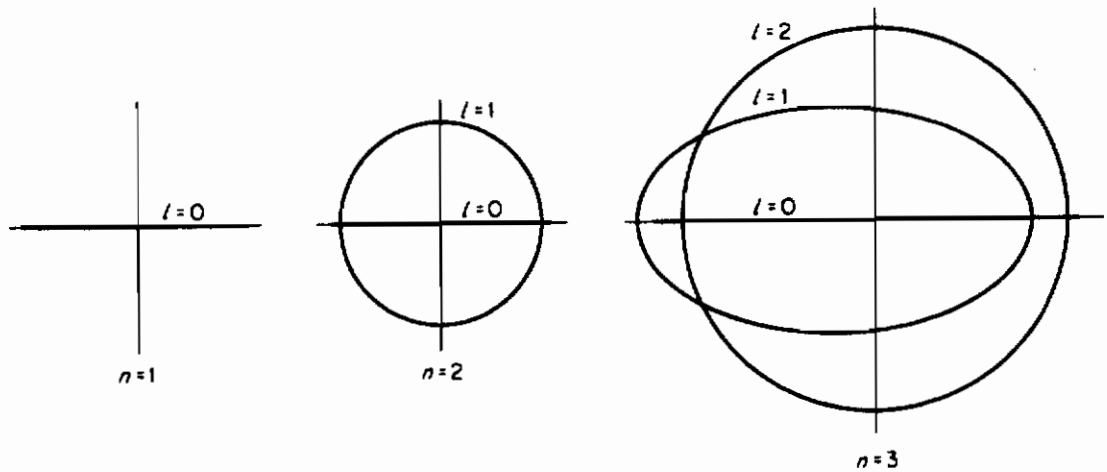
کوانتش فضائی (m_l) میل کلاسیکی صفحه مدار نسبت به‌محور z را محدود می‌کند. حالت ψ_{nlm_l} شامل کوانتش جهتی‌نسبت به‌محورهای x و y نیست. بنابراین قائم بر سطح می‌تواند روی هرکجا از مخروطی حول محور z قرار گیرد (شکل ۵ ــ ۵).

احتمال‌یافتن الکترون هیدرژنی در یک عنصر حجم معین از فضا عبارت است از

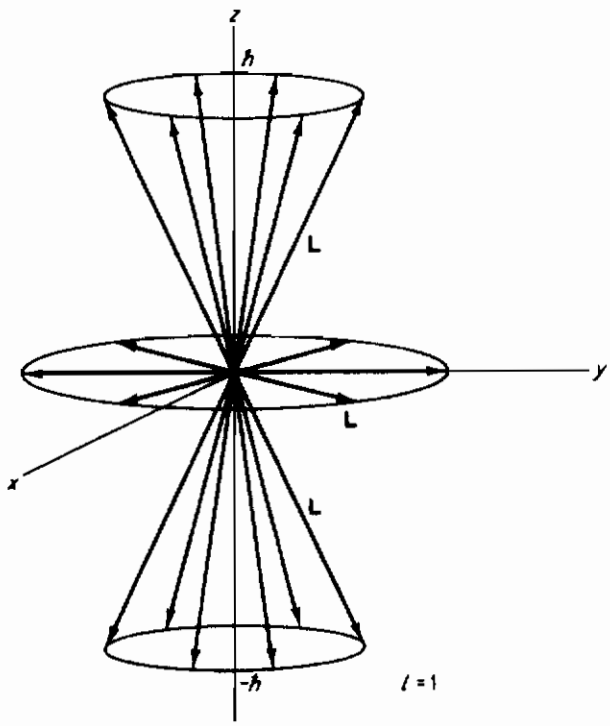
$$\mathscr{P}_{nlm_l}\, d\mathbf{r} = R_{nl}^2 |Y_{lm_l}|^2 r^2\, dr\, d\Omega$$

که در آن $d\Omega = \sin\theta\, d\theta\, d\phi$. این عبارت می‌تواند به‌یک چگالی زاویه‌ای $|Y_{lm_l}|^2$ و یک چگالی شعاعی $R_{nl}^2 r^2$ تجزیه شود . چگالی اول به‌احتمال یافتن الکترون در داخل یک زاویه حجمی $d\Omega$ در اطراف مبداء (پروتون) وابسته است . خاطرنشان کنیم که چگالی زاویه ای عبارت است از

$$|Y_{lm_l}|^2 = \Theta_{lm_l}^2$$

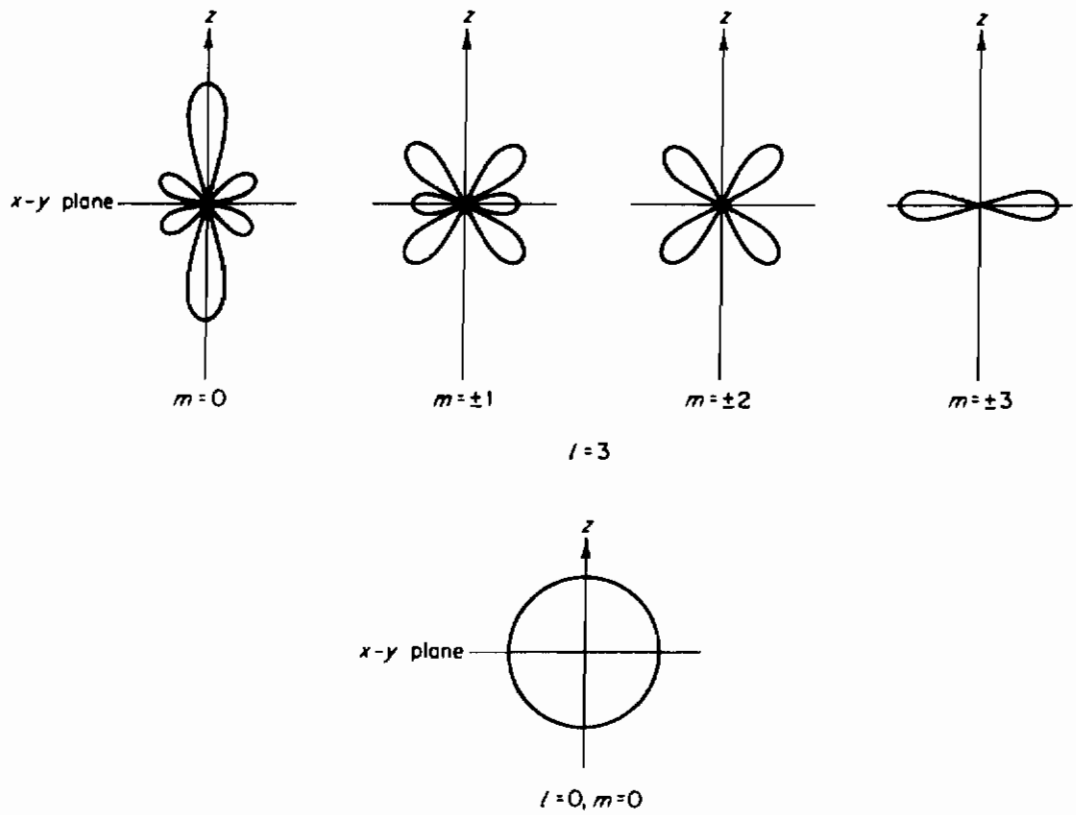


شکل (۵ــ۴) . بعضی مدارهای نیمه کلاسیکی برای حالتهای n ، l .



شکل (۵ــ۵) .مخروطهای "آماری" وابسته به‌کوانتش فضائی تکانهٔ زاویه‌ای

و فقط تابع زاویه قطبی θ است و به‌زاویه سمتی ϕ بستگی ندارد. چگالی‌زاویه‌ای به‌طورمناسبی در یک نمودار قطبی (شکل ۵ ــ ۶) ترسیم شده است.



شکل (۵ــ۶). منحنیهای قطبی‌چگالیهای زاویه‌ای $|Y_{lm_l}|^2$ وابسته به‌حالتهای $l=3$ و $l=0$

ذره‌ای که در حالت $l=3$ ، $m_l=0$ است به‌احتمال خیلی زیاد در $\theta=0$ یا $\theta=\pi$ قرار دارد. در حالت $l=3$ ، $m_l=3$ بیشینه احتمال در $\theta=\pi/2$ (صفحه xy) رخ می‌دهد.

چگالی احتمال شعاعی $R_{nl}^2 r^2$ مربوط است به‌احتمال یافتن الکترون در یک لایه کروی به‌ضخامت dr در یک فاصله r از مبداء (شکل۵ــ۷). توجه کنیم که موقعیت شعاعی بیشینه احتمال برای حالت پایه ψ_{100} در $r_{max}=a_0$ رخ می‌دهد، که‌متناظربانتیجه بوهر است. امامهمتر از همه مکان متوسط نسبت به‌مبداء، یعنی

$$\langle r\rangle_{nl}=\int_0^\infty R_{nl}\, r R_{nl}\, r^2\, dr$$

است. محاسبه انتگرالهائی از نوع

$$\langle r^\nu\rangle_{nl}=\int_0^\infty R_{nl}\, r^\nu R_{nl}\, r^2\, dr$$

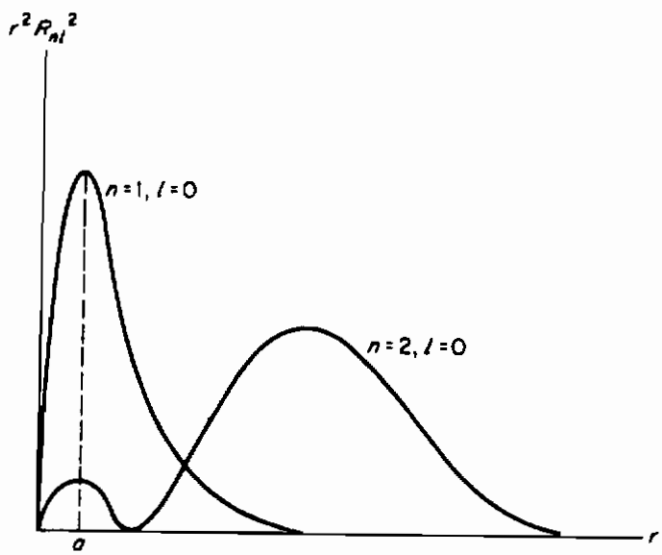
نسبتا" مشکل است . ما نتایج چندتا ازآنها را در زیر می‌آوریم*

$$\langle r\rangle_{nl} = n^2 a\left[1 + \frac{1}{2}\left\{1 - \frac{l(l+1)}{n^2}\right\}\right]$$

$$\langle r^2\rangle_{nl} = \frac{1}{2} n^2[5n^2 + 1 - 3l(l+1)]a^2$$

$$\langle r^{-1}\rangle_{nl} = \frac{1}{n^2 a} \qquad (۷۶-۵)$$

$$\langle r^{-2}\rangle_{nl} = \frac{1}{n^3(l+\frac{1}{2})a^2}$$



شکل (۵ـ۷) . چگالیهای‌احتمال شعاعی برای حالتهای ψ_{100} و ψ_{200} در هیدرژن

می‌توان سئوال زیر را مطرح کرد : با چه دقتی مکان الکترون در یک مدار از نظر شعاعی جایگزیده است ؟ برای پاسخ به‌این سئوال باید عدم قطعیت Δr_n در اطراف مقدارقابل‌انتظار $\langle r\rangle_n$ را محاسبه کرد . با استفاده از تعریفی که در فصل ۳ آمده است ، و نتایج موجود در

---

* به‌کتاب زیر مراجعه کنید .

H.A. Bethe and E.E. Salpeter, "Quantum Mechanics of one and Two Electron Atomes," P.17. Springer-Verlag, Berlin, 1957.

(۵–۷۶)، Δr_n و $\langle r\rangle_n$ می‌توانند به‌آسانی محاسبه شوند.
محاسبه حد نسبت

$$\lim_{n,l\to\infty}\frac{\Delta r_{nl}}{\langle r\rangle_{nl}}=\lim_{n,l\to\infty}\frac{(\langle r^2\rangle_{nl}-\langle r\rangle_{nl}^2)^{1/2}}{\langle r\rangle_{nl}}$$

جالب و مفید خواهد بود. با گذاردن l برابر با مقدار بیشینه آن، $l_{\max}=n-1$ ، و با استفاده از (۵–۷۶)، در حد $n\to\infty$ خواهیم داشت

$$\frac{\Delta r_{n,n-1}}{\langle r\rangle_{n,n-1}}=\frac{1}{(2n+1)^{1/2}}\xrightarrow[n\to\infty]{}0$$

بنابراین چگالیهای احتمال برای مقادیر بزرگ n و l در اطراف شعاعهای بوهر کاملا" معین خواهند شد و متناظر با مدارهای شبه‌دایره‌ای نظریه نیمه‌کلاسیکی بوهر خواهند بود.
مقدار قابل انتظار $V=-e^2/r$ می‌تواند با استفاده از (۵–۷۶) به‌دست آید که نتیجه می‌دهد

$$\langle V\rangle_{nl}=\left\langle\frac{-e^2}{r}\right\rangle_{nl}=-e^2\langle r^{-1}\rangle_{nl}=-\frac{e^2}{n^2a}=2\varepsilon_n$$

چون $\langle T+V\rangle_{nl}=\langle\mathscr{H}\rangle_{nl}=\varepsilon_n$ ، نتیجه می‌شود

$$\langle T\rangle_{nl}=\varepsilon_n-\langle V\rangle_{nl}=-\varepsilon_n=-\tfrac{1}{2}\langle V\rangle_{nl} \qquad (۵-۷۷)$$

در مکانیک کلاسیکی، که در آن مقادیر قابل انتظار به‌وسیله متوسط های زمانی جایگزین شده‌اند، نیز چنین است، یعنی، $\bar{T}=-\frac{1}{2}\bar{V}$ (رک مسائل ۲–۳ و ۴–۱۰).

۱۲ – پاریته و مسئله نیروی مرکزی

چون هر هامیلتونی نیروی مرکزی در اثر انعکاس نسبت به‌مبداء تغییرناپذیراست $[\mathscr{H}_{cf}(-\mathbf{r})=\mathscr{H}_{cf}(\mathbf{r})]$ ، با عملگر پاریته جابه‌جاپذیر است. در نتیجه باید حداقل یک مجموعه از ویژه تابعهای انرژی نیروی مرکزی با پاریته معین وجود داشته باشد. این که آیا حالتهای $\psi_{nlm_l}(r,\theta,\phi)$ چنین مجموعه‌ای هستند را اکنون بررسی می‌کنیم.
انعکاس نسبت به‌مبداء $\mathbf{r}\to-\mathbf{r}$ به‌وسیله $x\to-x$ ، $y\to-y$ ، $z\to-z$ ،

یا در مختصات کروی به‌وسیله $r \to r,\ \theta \to \pi - \theta$ ، $\phi \to \phi + \pi$ (شکل ۵ــ۸) نمایش داده خواهد شد . جایگذاری $\theta \to \pi - \theta$ معادل است با $u \to -u$، که در آن $u = \cos\theta$. چون قسمت شعاعی R_{nl} تحت انعکاس بی‌تأثیر خواهد ماند ، ما فقط رفتار هماهنگ‌های کروی

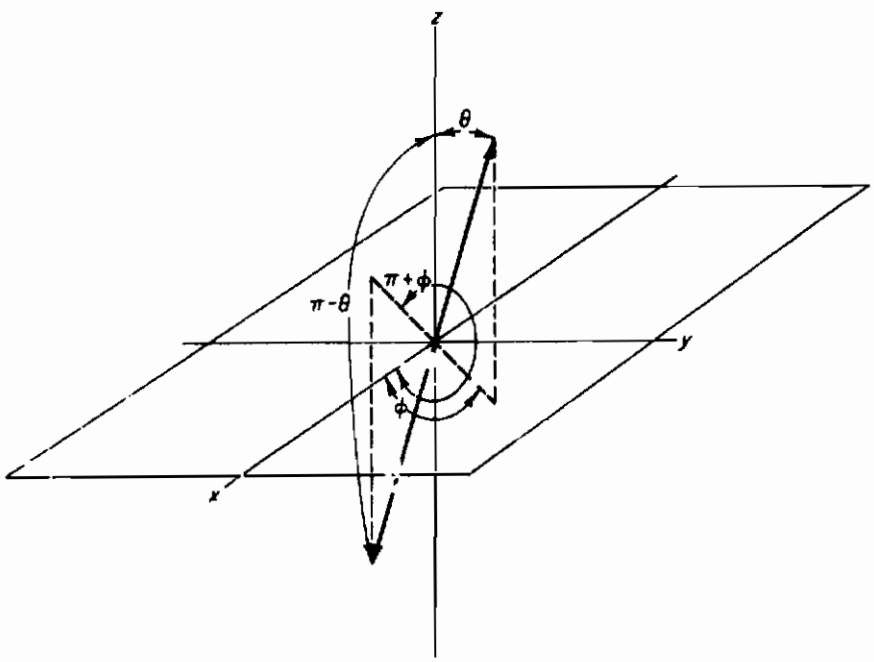
$$Y_{lm_l}(\theta, \phi) \propto (1 - u^2)^{|m_l|/2} \frac{d^{|m_l|}}{du^{|m_l|}} P_l(u) e^{im_l\phi}$$

را در نظر می‌گیریم . در اثر انعکاس، قسمت ϕ خواهد شد

$$e^{im_l\phi} \to e^{im_l(\phi+\pi)} = e^{im_l\pi} e^{im_l\phi} = (-1)^{m_l} e^{im_l\phi}$$

یعنی ، اگر فقط m_l فرد باشد علامت آن تغییر خواهد کرد . تنها جمله‌ای در Y_{lm_l} که انعکاس $u \to -u$ روی آن تأثیر می‌کند عبارت است از

$$\frac{d^{|m_l|}}{du^{|m_l|}} P_l(u)$$



شکل (۵ــ۸) عمل پاریته (انعکاس) در مختصات کروی

چون این یک چندجمله‌ای است که بسته به‌مقدار $l - |m_l|$ زوج یا فرد است ، علامت آن فقط در صورتی تغییر می‌کند که $l - m_l$ فرد باشد . ما دومورد را در نظر می‌گیریم :

مورد (الف) : l زوج است . اگر m_l فرد باشد ، قسمت ϕ تغییر علامت می‌دهد . اما چون $l - m_l$

نیز فرد است قسمت θ نیز تغییر علامت می‌دهد و بنابراین ویژه تابع بدون تغییر می‌ماند. همین‌طور اگر m_l زوج باشد، تغییری در ψ_{nlm_l} رخ نمی‌دهد.

مورد (ب): l فرد است. اگر m_l فرد باشد، بازهم قسمت ϕ تغییرعلامت می‌دهد. اما چون $l - m_l$ اکنون زوج است قسمت θ بدون تغییر باقی می‌ماند و بنابراین Y_{lm_l} تغییر علامت می‌دهد. اگر m_l زوج باشد نتیجه مشابهی به‌دست می‌آید.

نتیجه می‌گیریم که ویژه حالتهای نیروی مرکزی که در مختصات کروی به‌دست می‌آیند دارای پاریته معینی هستند، و بسته به‌اینکه مقادیر l فرد یا زوج باشند به‌ترتیب فرد یا زوج خواهند بود. بنابراین علاوه بر خواص معمولی ویژه مقدار، این حالتها دارای خاصیت

$$\hat{P}|n, l, m_l\rangle = (-1)^l|n, l, m_l\rangle$$

یا

$$\psi_{nlm_l}(-\mathbf{r}) = (-1)^l\psi_{nlm_l}(\mathbf{r}) \qquad (۷۸-۵)$$

می‌باشند

۱۳ ـ اثر میدان مغناطیسی یکنواخت روی مسئله نیروی مرکزی

اکنون می‌خواهیم نشان دهیم که کاهشی که میدان $\mathbf{B}$ در تقارن ایجاد می‌کند منجر به‌حذف تبهگنی جهتی (نسبت به m_l) می‌شود. میدان مغناطیسی مشتق از یک پتانسیل برداری $\mathbf{A}$ به‌صورت

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \qquad (۷۹-۵)$$

است. این $\mathbf{A}$ است و نه $\mathbf{B}$ که مستقیما" در هامیلتونی کلاسیکی دخالت می‌کند. این هامیلتونی طبق (۲ـ۶۲) عبارت است از

$$\mathscr{H} = \frac{(\mathbf{p} - (q/c)\mathbf{A})^2}{2m} + V(r) \qquad (۸۰-۵)$$

که در آن q بار ذره موردنظر و c سرعت نور است. اگر میدان مغناطیسی یکنواخت باشد، یعنی، مشتقات فضائی آن صفرباشند، (۵ـ۷۹) می‌تواند معکوس شود و به‌صورت $\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{r}$ درآید. این رابطه می‌تواند با گرفتن چرخش از دوطرف آن (برای $\mathbf{B}$ ی ثابت) مورد تحقیق

قرار گیرد . خواهیم داشت

$$\nabla \times \mathbf{A} = \nabla \times (\tfrac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{r}) = \tfrac{1}{2}[(\nabla \cdot \mathbf{r})\mathbf{B} - (\nabla \mathbf{r}) \cdot \mathbf{B}] = \tfrac{1}{2}[3\mathbf{B} - \mathbf{B}] = \mathbf{B}$$

که همان نتیجه خواسته شده است .

در این صورت هامیلتونی (۵ــ۸۰) به‌صورت زیر در می‌آید

$$\begin{aligned}\mathscr{H} &= \frac{p^2}{2m} + V(r) - \frac{q}{mc}\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + \frac{q^2}{2mc^2}A^2 \\ &= \frac{p^2}{2m} + V(r) - \frac{q}{2mc}\mathbf{p} \cdot \mathbf{B} \times \mathbf{r} + \frac{q^2}{2mc^2}\left|\frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{r}\right|^2 \qquad (۸۱-۵)\end{aligned}$$

در عمل ، میدان مغناطیسی معمولا" آنقدر ضعیف* است که جمله حاوی توان دوم $\mathbf{B}$ حذف می‌شود . با جابه‌جاکردن عوامل در ضرب سه‌گانه ، (۵ــ۸۱) خواهد شد

$$\mathscr{H} = \frac{p^2}{2m} + V(r) - \frac{q}{2mc}(\mathbf{r} \times \mathbf{p}) \cdot \mathbf{B} = \frac{p^2}{2m} + V(r) - \boldsymbol{\mu}_l \cdot \mathbf{B} \qquad (۸۲-۵)$$

که در آن

$$\boldsymbol{\mu}_l = \frac{q}{2mc}\mathbf{r} \times \mathbf{p} = \frac{q}{2mc}\mathbf{L}$$

گشتاور دوقطبی مغناطیسی مداری ذره باردار است . در نتیجه ، برای میدانهای ضعیف ، سیستم دینامیکی حامل یک دوقطبی مغناطیسی است که وابسته به‌تکانهٔ زاویه‌ای مداری است. به‌جا و مناسب است که یک تعمیم ساده و اولیه‌ای از (۵ــ۸۲) با نوشتن

$$\boldsymbol{\mu}_l = g_l \frac{q}{2mc}\mathbf{L} \qquad (۸۳-۵)$$

که در آن $g_l = 1$ ضریب ژیرو مغناطیسی مداری یا ضریب " g "** نامیده می‌شود ، بنمائیم .

---

* این تقریب وقتی معتبر است که انرژی مداری درمقایسه باانرژی مغناطیسی وابسته‌به‌میدان خارجی $\mathbf{B}$ بزرگ باشد . برای بحث پیرامون اثر زیمن مربعی به‌کتاب زیر مراجعه کنید

H.A. Bethe and R.W. Jackiw," intermediate Quantum Mechanics," Benjamin New York 1968, P. 122.

** نسبت $\mu_l/L = g_l q$ نسبت ژیرومغناطیسی نامیده می‌شود .

برای سهولت ، دستگاه محورهای مختصات خود را طوری انتخاب می‌کنیم کـــه B در امتداد محور z باشد . در این صورت محور z یک محور فیزیکی کاملا" معین است و دیگر یک محور ریاضی صرف نیست .

هامیلتونی مکانیک کوانتومی خواهد شد

$$\mathscr{H} = \mathscr{H}_{cf} - \frac{g_l q}{2mc} B\hat{L}_z \qquad (۸۴-۵)$$

که در آن

$$\mathscr{H}_{cf} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r)$$

برای پیداکردن ویژه تابعها و ویژه مقدارهای این هامیلتونی جدید مشاهده مـــی‌کنیم کـه $[\mathscr{H}, \mathscr{H}_{cf}] = 0$. معنی این مطلب این است که دو هامیلتونی دارای یک مجموعه ویژه تابع مشترک هستند . لذا ممکن است که ویژه تابعهای $\mathscr{H}_{cf}$ که قبلا" به‌دست آورده شده‌اند ویـژه تابعهای $\mathscr{H}$ نیز باشند . این مطلب با نوشتن

$$\begin{aligned}\mathscr{H}\psi_{nlm_l} &= \mathscr{H}_{cf}\psi_{nlm_l} - \frac{g_l qB}{2mc}\hat{L}_z\psi_{nlm_l} \\ &= \left(\varepsilon_{nl} - \frac{g_l qBm_l\hbar}{2mc}\right)\psi_{nlm_l} \qquad (۸۵-۵)\end{aligned}$$

تأیید می‌شود . بنابراین توابع ψ_{nlm_l} ویژه تابعهای* $\mathscr{H}$ نیز هستند ولی با ویژه مقدارهای اصلاح شده‌ای که توسط

$$\varepsilon_{nlm_l} = \varepsilon_{nl} - m_l\mu_B B \qquad (g_l = 1)$$

---

* توجه کنید که ویژه تابعها توسط میدان مغناطیسی بدون تغییر می‌مانند . بخصوص، حالتها خصوصیات پاریته‌ای خود را " حفظ می‌کنند " . این مطلب می‌رساند که جمله مغناطیسـی درهامیلتونی ، یعنی $qL_zB/2mc$ ، باید در اثر انعکاس تغییرناپذیر باشد (یعنی ، باعملگر پاریته جابه‌جاپذیر باشد) . چون B یک ثابت است ، L باید در اثر انعکاس تغییرناپذیر باشد . درواقع این چنین نیز هست زیرا در اثر انعکاس داریم ، $\mathbf{r} \to -\mathbf{r}$ و $\mathbf{p} \to -\mathbf{p}$ ، بنابراین $\mathbf{L} \to -\mathbf{r} \times -\mathbf{p} = \mathbf{L}$.

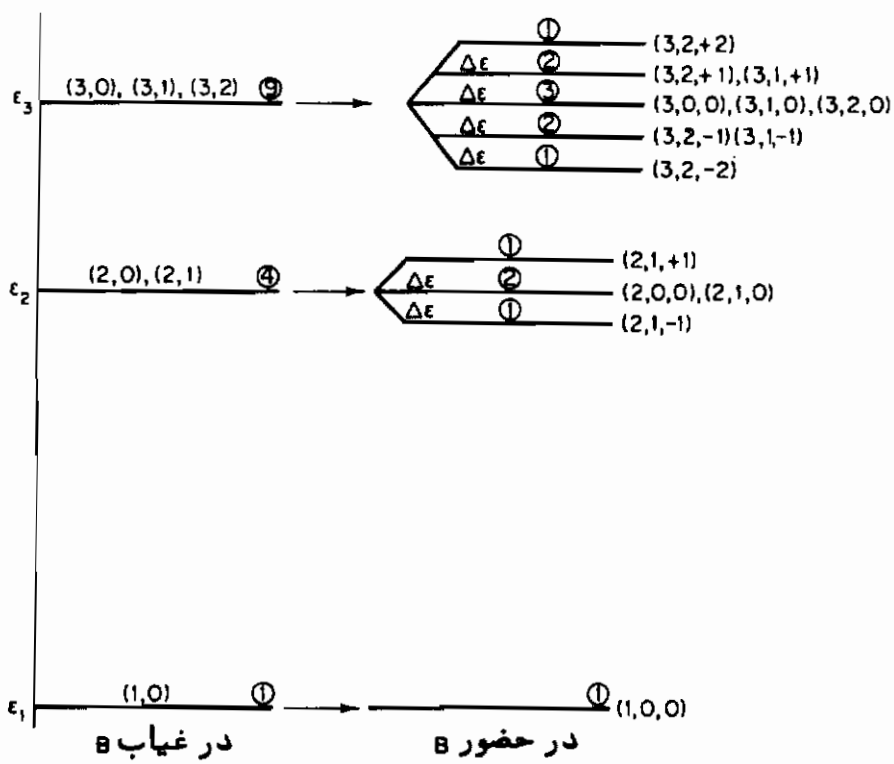
داده می‌شوند . پارامتر $\mu_B = q\hbar/2mc$ ماگنتون بوهر نامیده می‌شود و یکی از مشخصه‌های ذره است . مقدار ماگنتون بوهر برای الکترون عبارت است از

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc} \simeq 0.927 \times 10^{-20} \quad \text{erg/gauss} \qquad (۸۶-۵)$$

در این صورت انرژی علاوه بر l ، n تابع m_l نیز می‌باشد ؛ بدین ترتیب میدان مغناطیسی تبهگنی جهتی را از بین می‌برد . از اینجا منشاء عبارت "عدد کوانتومی مغناطیسی" برای m_l آشکار می‌شود . برای الکترون هیدرژنی ، تبهگنی تصادفی (نسبت به l) باقی می‌ماند . با قراردادن $q = -e$ ترازهای بوهر به‌ترازهای

$$\varepsilon_{nm_l} = \frac{\varepsilon_1}{n^2} + \frac{m_l e\hbar B}{2mc} \qquad (۸۷-۵)$$

جابه‌جا می‌شوند . این جابه‌جایی به‌اثر عادی زیمن (شکل ۵-۹) معروف است . قابل تذکر است که



شکل (۵-۹) . اثر زیمن در هیدرژن . تبهگنی‌تر از در داخل دایره مشخص شده است . توجه کنیم که میدان B تبهگنی را به‌طور کامل از بین نمی‌برد ، تبهگنی تصادفی (l) باقی می‌ماند .

جابه‌جائیهای انرژی زیر لایه‌های مغناطیسی به‌صورت مضاربی از

$$\Delta\varepsilon(\text{mag}) = \frac{e\hbar B}{2mc}$$

ظاهر می‌شوند .

کمیت (مستقل از $\hbar$) کلاسیکی

$$\omega_L = \frac{\Delta\varepsilon(\text{mag})}{\hbar} = \frac{eB}{2mc}$$

عبارت است از فرکانس لارمور حرکت تقدیمی* مداری‌که در تحلیل کلاسیکی (۵–۸۰) به‌دست آمده است .

در این شرایط ویژه حالتهای $\mathscr{H}$ به‌طور همزمان ویژه حالتهای $\hat{L}^2$ و مولفه L در امتداد B (در این مورد L_z) نیز هستند . مولفه‌های دیگر L_x و L_y مقدار صریحی ندارند ، می‌توان ثابت کرد که در این حالتها داریم

$$\langle L_x\rangle_{nlm_l} = \langle L_y\rangle_{nlm_l} = 0 \qquad (۸۸-۵)$$

بنابراین به‌طور متوسط مولفه تکانه زاویه‌ای عمود بر B صفر است . به‌طور معادل ، L از نظر آماری به‌طور کاتوره‌ای در روی مخروطی حول B قرار دارد** (شکل ۵ – ۱۰) .

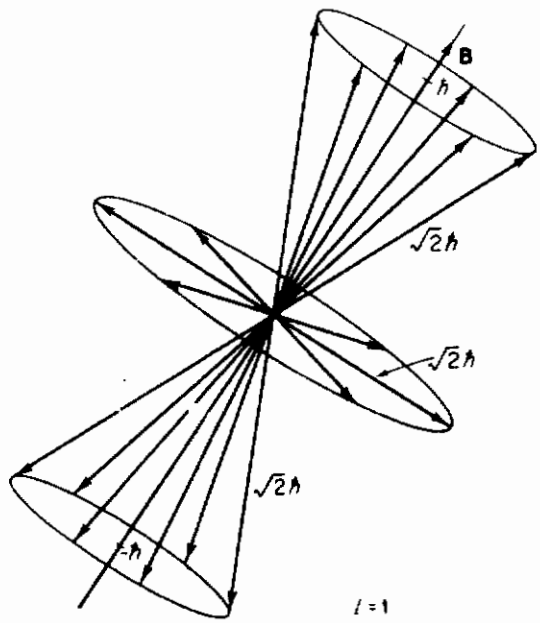
وقتی خطوط گسیلی در هیدرژن با طیف نماهایی با قدرت تفکیک زیاد مشاهده‌می‌شوند، جابه‌جائیهای خطوط با اثر عادی زیمن در توافق کمی نیستند . این مغایرت در فصل ۶ با این اصل موضوع حل خواهد شد که الکترون علاوه بر گشتاور مغناطیسی مداری حامل یک دو-قطبی مغناطیسی است که توسط اسپین ذاتی الکترون ایجاد شده‌است . قبل از بحث در مورد اسپین ، سعی می‌کنیم که ویژه مقدارهای تکانه زاویه‌ای را با روش نردبانی به‌دست‌آوریم .

---

* برای بحث در باره حرکت تقدیمی لارمور به‌کتاب زیر مراجعه کنید

K.R. Symon, "Mechanics," 3rd-ed. P. 284. Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1971.

** ازنظر کلاسیکی‌می‌توانیم‌بگوئیم‌که L حول B حرکت تقدیمی دارد ، اما از نظر مکانیک کوانتومی حالت مانا است . بنابراین مخروط طبیعتا" آماری است و نه دینامیکی .



شکل (۵—۱۰) . توزیع L روی مخروطهای حول B . از نظر کلاسیکی بردار L حول B با فرکانس $\omega_L = eB/2mc$ حرکت تقدیمی انجام می‌دهد (حرکت تقدیمی لارمور)

این انحراف از موضوع ،دو هدف مهم دارد . نخست ، یکبار دیگر طبیعت عمومی‌بودن صورتبندی بردار ــ عملگر را نشان می‌دهد . دوم ، که برای منظورهای مهمتری است ، اینکه تنها بر پایه جبر "جابه‌جاگرها " به‌این نتیجه هدایت می‌شویم که اعداد کوانتومی تکانه زاویه‌ای می‌توانند هم نیمه‌صحیح باشند و هم صحیح . در مورد تکانه زاویه‌ای مداری ، که برای آن یک مشابه‌کلاسیکی و درنتیجه یک ویژه تابع وجود دارد ، باید نیمه‌صحیح‌ها را طرد کنیم* . با این وجود ، در یک مورد صرفا" مکانیک کوانتومی ، مثل اسپین ذاتی الکترون، تکانه‌های نیمه صحیح با روابط جابه‌جائی بنیادی برای مؤلفه‌های تکانه زاویه‌ای ، همان‌طور که در زیر نشان خواهیم داد ، سازگارند .

۱۴ ــ روش نردبانی

می‌خواهیم ویژه مقدارها و ویژه بردارهای تکانهٔ زاویه‌ای را فقط با استفاده از روابط

---

* یادآور می‌شویم که این شرط تک مقداری‌بودن ψ_{nlm_l} بود که به‌معرفی اعداد صحیح m_l منجر شد .

جابه‌جائی

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\hat{L}_k \qquad (ijk = xyz \quad \text{به‌ترتیب دوره‌ای}) \qquad (۸۹ - ۵)$$

به‌دست آوریم . این روابط می‌توانند به‌صورت تعمیمی از کروشه پواسن (۲–۸۰) یا مستقیما" با استفاده از روابط جابه‌جائی برای $\mathbf{p}$ و $\mathbf{q}$ به‌دست آیند .

اکنون به‌معادلات ویژه مقداری

$$\hat{L}^2|l, m_l\rangle = \hbar^2\lambda_l|l, m_l\rangle \qquad (\text{الف } ۹۰ - ۵)$$

$$\hat{L}_z|l, m_l\rangle = \hbar\lambda_{m_l}|l, m_l\rangle \qquad (\text{ب } ۹۰ - ۵)$$

می‌پردازیم ، که در آنها λ_l و λ_{m_l} باید تعیین شوند . مقادیر قابل‌انتظار $\langle L_x^2\rangle$ ، $\langle L_y^2\rangle$ و $\langle L_z^2\rangle$ غیرمنفی‌اند ، که از آن نتیجه می‌شود

$$\langle L^2\rangle = \langle L_x^2\rangle + \langle L_y^2\rangle + \langle L_z^2\rangle \geqslant \langle L_z^2\rangle$$

یا مخصوصا"

$$\langle l, m_l|\hat{L}^2|l, m_l\rangle \geqslant \langle l, m_l|\hat{L}_z^2|l, m_l\rangle$$

با استفاده از (۵–۹۰) نتیجه می‌شود که پارامترهای ویژه مقدار دارای محدودیت زیراند

$$\lambda_l \geqslant \lambda_{m_l}^2 \qquad (۹۱ - ۵)$$

عملگر (غیر هرمیتی) $\hat{L}^+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y$ و الحاقی آن $\hat{L}^- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y$ را وارد می‌کنیم . با تأثیر دادن $\hat{L}^\pm$ روی (۵ – ۹۰الف) و با توجه به $[\hat{L}^\pm, \hat{L}^2] = 0$ ، نتیجه می‌گیریم

$$\hat{L}^\pm\hat{L}^2|l, m_l\rangle = \hbar^2\lambda_l\hat{L}^\pm|l, m_l\rangle$$

یا

$$\hat{L}^2\{\hat{L}^\pm|l, m_l\rangle\} = \hbar^2\lambda_l\{\hat{L}^\pm|l, m_l\rangle\}$$

بنابراین بردار داخل پرانتز نیز ویژه کت $\hat{L}^2$ با همان ویژه مقدار $\hbar^2\lambda_l$ است .

اکنون عملگر $\hat{L}^\pm$ را روی (۵ – ۹۰ ب) تاثیر می‌دهیم و خواهیم داشت

$$(\hat{L}_x \pm i\hat{L}_y)\hat{L}_z|l, m_l\rangle = \lambda_m \hbar(\hat{L}_x \pm i\hat{L}_y)|l, m_l\rangle \qquad (۹۲-۵)$$

با استفاده از روابط جابه‌جائی $\hat{L}_x\hat{L}_z = \hat{L}_z\hat{L}_x - i\hbar\hat{L}_y$ و $\hat{L}_y\hat{L}_z = \hat{L}_z\hat{L}_y + i\hbar\hat{L}_x$ ، می‌توان (۹۲-۵) را ساده کرد و به‌صورت

$$(\hat{L}_z\hat{L}^{\pm} \mp \hbar\hat{L}^{\pm})|l, m_l\rangle = \lambda_{m_l}\hbar\hat{L}^{\pm}|l, m_l\rangle$$

یا ترا نهادهٔ آن

$$\hat{L}_z\{\hat{L}^{\pm}|l, m_l\rangle\} = (\lambda_{m_l} \pm 1)\hbar\{\hat{L}^{\pm}|l, m_l\rangle\} \qquad (۹۳-۵)$$

نوشت . بنابراین کتهای داخل پرانتزها ویژه‌بردارهای $\hat{L}_z$ با ویژه مقدارهای $\lambda_{m_l} \pm 1$ هستند . می‌توان تحقیق کرد که کت بهنجار شده عبارت است از

$$|l, m_l \pm 1\rangle = \frac{1}{[\{\lambda_l - \lambda_{m_l}(\lambda_{m_l} \pm 1)\}\hbar^2]^{1/2}}\hat{L}^{\pm}|l, m\rangle \qquad (۹۴-۵)$$

عملگرهای $\hat{L}^+$ و $\hat{L}^-$ به‌ترتیب عملگرهای بالابرنده و پائین آورنده هستند و نتیجه می‌گیریم که مقادیر طیف $\hat{L}_z$ به‌اندازهٔ یک عدد صحیح باهم اختلاف دارند . با این وجود ، از (۹۱-۵) نتیجه می‌شود که λ_{m_l} کرانه‌دار است . از ملاحظات تقارن فضائی می‌توان فرض کرد که مقادیر λ_{m_l} نسبت به‌صفر متقارن‌اند و طبق

$$-\lambda_{m_0}, \quad -\lambda_{m_0}+1, \quad \ldots, \quad \lambda_{m_0}-1, \quad \lambda_{m_0} \qquad (۹۵-۵)$$

توسط کرانه λ_{m0} محدود می‌شوند . با این وجود ، غیرممکن است مجموعه‌ای از اعداد با فاصله‌های عدد صحیح داشته باشیم که در (۹۵-۵) صدق کنند مگر اینکه λ_{m0} یا صحیح باشد یا نیمه صحیح . به‌عنوان مثال ، اگر $\lambda_{m_0} = +\frac{2}{3}$ باشد غیرممکن است به‌وسیله فواصل با عدد صحیح به $-\frac{2}{3}$ رسید . لذا قرار می‌دهیم $\lambda_{m_0} = l$ که l یا صحیح است یا نیمه‌صحیح ؛ بنابراین نتیجه می‌شود $\lambda_{m_l} = m_l$ که در آن m_l بسته به‌مقدار l یا صحیح است یا نیمه صحیح. معادله (۹۵-۵) اکنون به‌صورت زیر در می‌آید

$$-l \leqslant m_l \leqslant l \qquad (l, |m_l| = 0, 1, 2, \ldots \quad \text{یا} \quad l, |m_l| = \tfrac{1}{2}, \tfrac{3}{2}, \ldots) \qquad (۹۶-۵)$$

روش نردبانی به‌این نتیجه اضافی منجر می‌شود که ، براساس (۸۹-۵) ، l و m_l ممکن است هم صحیح باشند هم نیمه‌صحیح . لیکن درموردی که $\hat{\mathbf{L}}$ دارای یک مشابه کلاسیکی‌است

(یعنی، $\hat{L}$ یک تابع بندادی از $\hat{r}$ و $\hat{p}$ است) و در نتیجه دارای یک ویژه تابع ψ_{lm_l} است، تک مقداری‌بودن آن مقادیر نیمه صحیح را طرد می‌کند. در مورد یک تکانه زاویه‌ای صرفاً" مکانیک‌کوانتومی (به‌عنوان‌مثال، اسپین)، خواهیم دید که مقادیر نیمه صحیح نه‌تنها مجاز هستند بلکه عملاً" لازم هم هستند.

برای پیداکردن مقدار λ_l مشاهده می‌کنیم که وقتی $\lambda_{m_l} = \lambda_{m_0} = l$ باشد، تاثیر عملگر بالابرنده حالت جدیدی ایجاد نمی‌کند، یعنی،

$$\hat{L}^+|l,l\rangle = 0 \qquad (۹۷-۵)$$

با استفاده از اتحاد

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = \hat{L}^-\hat{L}^+ + \hat{L}_z^2 + \hbar\hat{L}_z$$

خواهیم داشت

$$\hat{L}^2|l,l\rangle = \hbar^2\lambda_l|l,l\rangle$$

یا

$$(\hat{L}^-\hat{L}^+ + \hat{L}_z^2 + \hbar\hat{L}_z)|l,l\rangle = \hbar^2\lambda_l|l,l\rangle$$

با استفاده از (۵—۹۷) و (۵—۹۰ ب) نتیجه خواهیم گرفت

$$(l^2\hbar^2 + l\hbar^2)|l,l\rangle = \hbar^2\lambda_l|l,l\rangle$$

یا

$$\lambda_l = l(l+1)$$

که با نتایج قبلی مطابقت می‌کند. وقتی یکی از ویژه بردارهای $|l,m_l\rangle$ شناخته شده باشد، بردارهای مجاور می‌توانند با استفاده از (۵—۹۴) به‌دست آیند، که نتیجه می‌دهد

$$|l,m_l \pm 1\rangle = \frac{1}{\{[l(l+1) - m_l(m_l \pm 1)]\hbar^2\}^{1/2}}\hat{L}^\pm|l,m_l\rangle$$

ویژه‌تابعها می‌توانند با بیان (۵—۹۷) در مکانیک موجی و ایجاد یک معادله‌دیفرانسیل برای $Y_{l,l}$ به‌دست آیند. سپس ویژه تابعهای مجاور $Y_{l,l-1}$، با اعمال پائین آوری متوالی به‌روشی‌مشابه با روش به‌کار برده شده در فصل ۴ برای یک نوسانگر، به‌دست می‌آیند. نتایج اینجا با نتایج به‌دست آمده از مکانیک موجی مطابقت می‌کنند.

خاطرنشان کردیم که الگوی عادی زیمن یک تصویر ناقصی از ترازهای انرژی الکترون هیدرژنی در یک میدان مغناطیسی یکنواخت ارائه می‌دهد . هم‌چنین ثابت کردیم که یک تکانه زاویه‌ای غیرکلاسیکی (اگر وجود داشته باشد) می‌تواند دارای اعداد کوانتومی نیمه ـ صحیح یا صحیح باشد . این واقعیتها همراه با بعضی داده‌های تجربی ، که بعدا" موردبحث قرار خواهند گرفت ، به‌طور کاملا" طبیعی منجر به‌وجود *اسپین ذاتی* ـ موضوع فصل بعدی ـ خواهد شد .

مسائل

۵ـ۱ تابع حالت وابسته به‌حالت کت $|\beta\rangle$ در نمایش تکانه‌ای (پیوسته) به‌وسیله

$$\Psi_\beta(\mathbf{p}) = \langle \mathbf{p}|\beta\rangle$$

تعریف می‌شود . نشان دهید که $\Psi_\beta(\mathbf{p})$ تبدیل فوریه

$$\Psi_\beta(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r}|\beta\rangle$$

است ، یعنی

$$\Psi_\beta(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}\Psi_\beta(\mathbf{r})\, d\mathbf{r}$$

(راهنمائی : رابطه بستاری $\hat{1} = \int |\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}|\, d\mathbf{r}$ را در تعریف $\Psi_\beta(\mathbf{p})$ وارد کنید) .

۵ـ۲ نشان دهید چگونه می‌توان انرژی و ویژه تابع حالت پایه وابسته به‌یک پتانسیل جعبه‌ای متناهی ، یعنی پتانسیلی که برای آن داشته باشیم

$$V = 0 \qquad 0 \leqslant x \leqslant a,\quad 0 \leqslant y \leqslant b,\quad 0 \leqslant z \leqslant c \quad \text{برای}$$
$$V = V_0 \quad \text{برای جاهای دیگر}$$

به‌دست آورد .

۵ـ۳ با استفاده از تبدیل (۵ـ۲۶) نشان دهید که مولفه‌های $\hat{\mathbf{L}}$ به‌وسیله (۵ـ۳۴) داده می‌شوند .

۵ـ۴ با استفاده از روابط جابه‌جائی برای مولفه‌های $\hat{p}$ و $\hat{r}$ ، رابطه جابه‌جائی

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z$$

را ثابت کنید .

۵ـ۵ ثابت کنید که $\hat{L}^2$ و $\hat{L}_z$ با هر هامیلتونی نیروی مرکزی جابه‌جاپذیراند .

۵ـ۶ تحقیق کنید که مسئله نوسانگر همسانگرد در مختصات قطبی استوانه‌ای تفکیک‌پذیر است و چند ویژه‌مقدار و ویژه‌تابع اول آنرا به‌دست آورید . این نتایج را باجوابهای به‌دست آمده در مختصات دکارتی مقایسه کنید .

۵ـ۷ نشان دهید چگونه می‌توان انرژی و ویژه تابع حالت پایه را برای ذره‌ای به جرم M در یک چاه پتانسیل کروی

$$V = -V_0 \qquad (0 \leqslant r \leqslant R)$$
$$V = 0 \qquad (\text{جاهای دیگر})$$

محاسبه کرد (فرض کنید برای این حالت $l = 0$ است)

۵ـ۸ تحقیق کنید که محتمل‌ترین مکان برای الکترون هیدرژنی در حالت پایه در $r = a$ است که در آن $a = \hbar^2/me^2$ اولین شعاع بوهر است .

۵ـ۹ وقتی سیستمی در یک ویژه حالت $\hat{L}_z$ که آنرا با $|nlm_l\rangle$ نمایش می‌دهیم ، باشد نشان دهید که $\langle L_x\rangle = \langle L_y\rangle = 0$. (راهنمائی: از $[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\hat{L}_k$ استفاده کنید

۵ـ۱۰ فرمولهای مربوط به‌تبهگنی نوسانگر همسانگرد ، یعنی، $\text{تبهگنی} = \frac{1}{2}(\bar{n}+1)(\bar{n}+2)$ ، را برای تراز $\bar{n} = 3$ با شمارش ویژه تابعهای این تراز در مختصات دکارتی و کروی ، امتحان کنید .

۵ـ۱۱ انرژی حالت پایه و اولین شعاع بوهر در هیدرژن را با کمینه‌سازی تابع انرژی

$$\mathscr{E} = \frac{(\Delta p)^2}{2m} - \frac{e^2}{\Delta r}$$

و با توجه به‌محدودیت $\Delta p\, \Delta r \simeq \hbar$ محاسبه کنید . $\Delta r_{\min}$ و $\mathscr{E}_{\min}$ به‌دست آمده را با مقادیر صحیح آنها مقایسه کنید .

۵ـ۱۲ چون $\hat{L}_z = (\hbar/i)\,\partial/\partial\phi$ مزدوج بندادی زاویه سمتی ϕ است ، انتظار داریم که رابطه

عدم قطعیت زیر برقرار باشد

$$\Delta L_z \, \Delta\phi \geqslant \tfrac{1}{2}\hbar,$$

اما همیشه می‌توان، از دید نظریه، L_z را با دقت نامحدود (یعنی، $\Delta L_z \to 0$) اندازه‌گرفت. با این وجود $\Delta\phi$ باید همیشه کوچکتر یا مساوی با 2π باشد زیرا این بازه تمام مقادیر زاویه سمتی را می‌پوشاند. این تناقض ظاهری با اصل عدم‌قطعیت را توضیح دهید.

۵–۱۳ (الف) نشان دهید که تکانه شعاعی می‌تواند به‌وسیله

$$\hat{p}_r = \frac{1}{2}\left[\frac{\hat{\mathbf{r}}}{\hat{r}}\cdot\hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{p}}\cdot\frac{\hat{\mathbf{r}}}{\hat{r}}\right] \to \frac{1}{2}\frac{\hbar}{i}\left[\frac{\mathbf{r}}{r}\cdot\nabla + \nabla\cdot\frac{\mathbf{r}}{r}\right] = \frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)$$

نمایش داده شود. هم چنین نشان دهید که

$$\frac{\hat{p}_r^{\,2}}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)$$

(ب) رابطه جابه‌جائی $[\hat{r}, \hat{p}_r] = i\hbar\hat{1}$ را تحقیق کنید.

مراجع پیشنهادی

Arfken, G., "Mathematical Methods for Physicists," 2nd ed. Academic Press, New York, 1970.

Bethe, H. A., and Salpeter, E. E., "Quantum Mechanics of One and Two Electron Atoms," Chapter 1a. Springer-Verlag, Berlin, 1957.
(This reference work represents one of the most comprehensive texts on hydrogen and helium ever written!)

Bohm, D., "Quantum Theory," Chapter 14. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1951.

Borowitz, S., "Fundamentals of Quantum Mechanics," Chapters 12 and 13. Benjamin, New York, 1967.

Merzbacher, E., "Quantum Mechanics," 2nd ed. Chapter 9. Wiley, New York, 1970.

Morse, P. M., and Feshbach, H., "Methods of Theoretical Physics," Volume I, Chapter 5. McGraw-Hill, New York, 1953.

Pauling, L., and Wilson, E. B., "Introduction to Quantum Mechanics," Chapter 4. McGraw-Hill, New York, 1935.

Saxon, D. S., "Elementary Quantum Mechanics," Chapter 9. Holden-Day, San Francisco, 1964.

۶

تکانه زاویه‌ای اسپینی

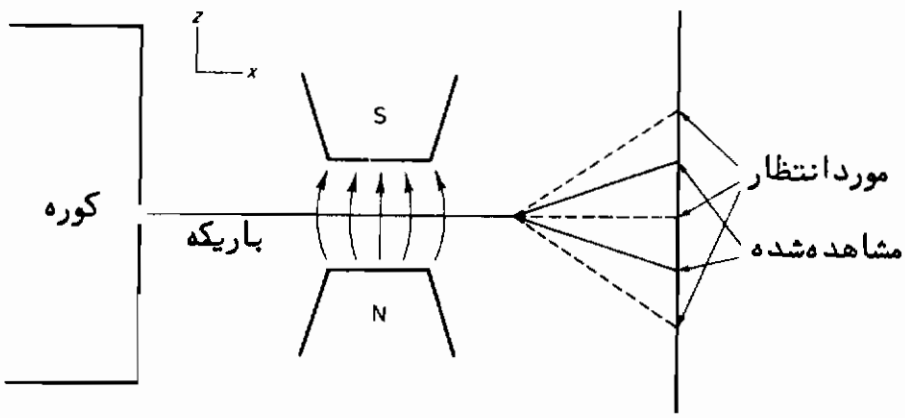
پیشرفتهای تجربی درسالهای ۱۹۲۰ داده‌هائی به‌دست دادند که فیزیکدانهارا به‌این نظریه هدایت کرد که ذرات بنیادی مثل الکترونها نه‌تنها دارای خواص موجی هستند بلکه ممکن است یک تکانهٔ زاویه‌ای اسپینی ذاتی نیز داشته باشند . در سال ۱۹۲۲ یک آزمایش به‌وسیله اشترن و گرلاخ این اسپین را به‌طور بسیار جالبی آشکار کرد . در این آزمایش یک باریکه ازاتمهای نقره از داخل یک میدان مغناطیسی کمی غیریکنواخت عبور داده شد (شکل ۶–۱) .اولا" ،غیریکنواختی‌میدان یک نیروی خالصی بر روی دوقطبی مغناطیسی وابسته به‌اتمهای باریکه‌ایجاد می‌کند .ثانیا" ،میدان جهتی (به‌عنوان مثال ، محور z)برای‌کوانتش فضائی ایجاد می‌کند . اثبات اینکه نیروی خالص متوسطی که بریک دوقطبی مغناطیسی‌وارد می‌شود عبارت است از$\langle F_z \rangle = \mu_z \partial B_z / \partial z$که در آن μ_z مولفه گشتاور دوقطبی مغناطیسی اتم در امتداد محور z است ، به‌عنوان تمرین واگذار می‌شود .

همان‌طور که در فصل ۵ بحث شد ، یک دوقطبی مغناطیسی از حرکت مداری الکترونها دراطراف هسته سرچشمه می‌گیرد . برای سهولت فرض می‌کنیم که این گشتاورازتنها الکترون خارجی‌ترین مدار هرکدام از اتمهای نقره ناشی می‌شود ، در نتیجه بر طبق (۵–۸۳)انتظار داریم که گشتاور مغناطیسی برابر باشد با

$$\mu_z = -\frac{1}{2}\frac{e}{mc} L_z = -\frac{1}{2}\frac{e\hbar}{mc} m_l \qquad (۶–۱)$$

بنابراین نیروی وارد به‌هراتم به‌زاویهٔ میل آن نسبت به‌محور z ، یعنی ، زیرحالت‌مغناطیسی آن ، بستگی دارد . اگر l یک عدد صحیح باشد ، که در مورد تکانه زاویه‌ای مداری همیشه

چنین است ، تعداد زیر حالات ، $2l+1$ ، فرد است و انتظار خواهیم داشت که باریکه طوری تجزیه شودکه تعداد خطوط روی پرده آشکارکننده فرد باشد . ولی وقتی آزمایش انجام‌گرفت فقط دوخط ظاهر شد . بنابراین گشتاورهای دوقطبی اتمهای نقره نمی‌توانستندبه‌وسیله تکانه زاویه‌ای مداری ایجاد شده باشند .



شکل (۶ـ۱) آزمایش اشترن ــ گرلاخ .

شواهد بیشتری ، حاکی از وجود اسپین ، از اندازه‌گیریهای طیف نمائی ساختار ریز روی طیف گسیلی اتمها به‌دست آمد . گودشمیت و اوهلنبک با این پیشنهاد که‌الکترون‌علاوه بر تکانهٔ زاویه‌ای مداری دارای یک اسپین داخلی یا تکانه زاویه‌ای ذاتی است که به‌وسیله اعداد کوانتومی s و m_s مشخص می‌شود ، اختلاف بین نظریه و تجربه را برطرف کردند . این اعداد کوانتومی به‌ترتیب مشابه‌های l ، m_l وابسته به‌تکانهٔ زاویه‌ای مداری می‌باشند . چون فقط دوتصویردرآزمایش‌اشترن‌ــ گرلاخ‌مشاهده‌شد ،اعدادکوانتومی به $s=\frac{1}{2}$ و $m_s=\pm\frac{1}{2}$ محدود شدند . نظریه اسپین بلافاصله به‌وسیله پاولی فرمولبندی شد و این همان نظریه‌ای است که اکنون موردبحث قرار خواهیم داد .

۱ ــ نظریه پاولی برای اسپین الکترون

درآغاز تاکید می‌کنیم که اسپین ذاتی یک ذره مشابه کلاسیکی ندارد . بنابراین مجسم کردن الکترون به‌صورت کره‌ای‌که حول محورخود می‌چرخد کاملا" نادرست است . اولا"، عملگر اسپین ، $\hat{S}$ ، یک تابع بندادی از $\hat{r}$ و $\hat{p}$ نیست و الکترون ساختارکلاسیکی داخلی‌ندارد. ثانیا" ، اگر یک حد کلاسیکی وجود می‌داشت ، طبق اصل تناظر ، وقتی s و m_s بزرگ بودند به‌این حد می‌رسیدیم . اما ، برخلاف l ، m_l در تکانه زاویه‌ای مداری ، مقادیر اسپین ذرات

بنیادی همیشه از مرتبه $\hbar$ می‌باشند .

در حالی که‌نظریه‌ای که موردبحث قرار می‌گیرد در مورد الکترون ($s = \frac{1}{2}$) صادق است، با کمی زحمت می‌تواند به‌مقادیر بالاتر اسپین ذاتی تعمیم داده شود*.

با استفاده از *اصول موضوع زیر* شروع می‌کنیم :

(الف) اسپین به‌وسیله یک عملگر هرمیتی $\mathbf{S}$ که مولفه‌های آن در روابط جابه‌جایی شبیه به (۵ـ۸۹) صدق می‌کنند نمایش داده می‌شوند

$$[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\hbar\hat{S}_k \qquad (i, j, k = x, y, z \qquad \text{با ترتیب دوره‌ای}) \qquad (۶-۲)$$

(ب) ویژه مقدارهای $\hat{S}^2$ عبارتنداز $s(s+1)\hbar^2$ که در آن $s = \frac{1}{2}$. به‌علاوه ، ویژه مقدارهای‌هرکدام از مؤلفه‌های $\mathbf{S}$ (به‌عنوان مثال $\hat{S}_z$) عبارتند از $m_s\hbar$ که در آن $|m_s| \leqslant s$ یا $m_s = \pm\frac{1}{2}$.

می‌توان اصل (الف) را به‌عنوان تعریف هرتکانه زاویه‌ای در نظر گرفت . اصل موضوع (ب) ایجاب می‌کند که اسپین کاملا" مکانیک کوانتومی است و هم‌چنین چون متغیر $\mathbf{r}$ درآن دخالت نمی‌کند ، مشابه مکانیک موجی برای آن وجود ندارد . وجود دو ویژه‌مقدار برای $\hat{S}_z$ پیشنهاد می‌کندکه عملگرهای اسپین باید در یک فضای "اسپینی "دوبعدی نمایش‌داده‌شوند .

دیدیم که ویژه‌بردارهای یک عملگر هرمیتی می‌توانند به‌عنوان یک پایه ، که عملگرها و بردارهای دیگر را در آن نمایش می‌دهیم ، به‌کار روند . در مورد اسپین ، معمول است که ویژه‌پایهٔ $\hat{S}_z$ را به‌کار می‌برند که در آن $\hat{S}_z$ به‌صورت ماتریس قطری

$$\hat{S}_z \to \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\hbar & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2}\hbar \end{pmatrix} \qquad (۶-۳)$$

نمایش داده می‌شود ، و ویژه بردارهای راست‌هنجار آن ، یعنی ،

$$|m_s\rangle = |\tfrac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \text{و} \qquad |m_s\rangle = |-\tfrac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad (۶-۴)$$

---

* ذرات با اسپینهای نیمه صحیح را فرمیون و آنهائی را که دارای اسپین صحیح هستند بوزون می‌نامیم . بعدا" (در فصل ۹) خواهیم دید که بوزونها و فرمیونها ازآمارهای متفاوتی تبعیت می‌کنند ،و در نتیجه رفتار ترمودینامیکی ماده‌ای که آنرا تشکیل می‌دهند کلا" متفاوت است .

به‌عنوان پایه به‌کار می‌روند . در این پایه عملگرهای دیگر به‌شکل

$$\hat{S}_x \to \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2}\hbar \\ \frac{1}{2}\hbar & 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{S}_y \to \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{2}i\hbar \\ \frac{1}{2}i\hbar & 0 \end{pmatrix} \qquad (۶-۵)$$

در می‌آیند . در نتیجه روابط جابه‌جایی (۶ـ۲) ، همان‌طور که از

$$\begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2}\hbar \\ \frac{1}{2}\hbar & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{2}i\hbar \\ \frac{1}{2}i\hbar & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{2}i\hbar \\ \frac{1}{2}i\hbar & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2}\hbar \\ \frac{1}{2}\hbar & 0 \end{pmatrix} = i\hbar\begin{pmatrix} \frac{1}{2}\hbar & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2}\hbar \end{pmatrix}$$

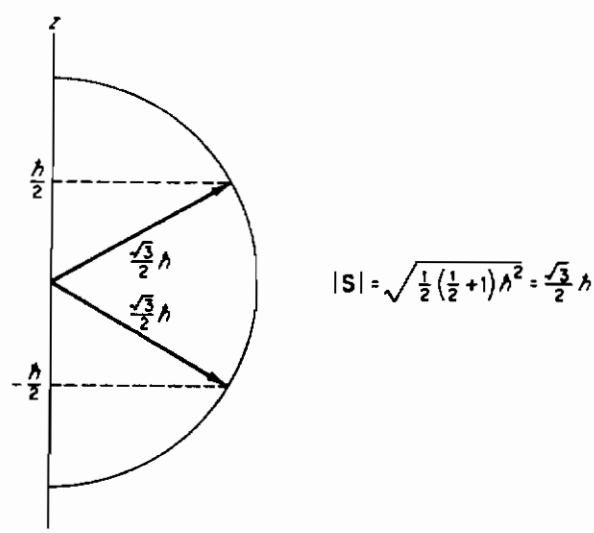
دیده می‌شود ، برقرار هستند . ماتریس $\hat{S}^2$ ، بعداز ساده‌شدن ، می‌شود

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_x{}^2 + \hat{S}_y{}^2 + \hat{S}_z{}^2 \to \tfrac{3}{4}\hbar^2\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \tfrac{3}{4}\hbar^2\hat{1} \qquad (۶-۶)$$

که از آن ویژه مقدارها به‌صورت

$$s(s+1)\hbar^2 = \tfrac{1}{2}(\tfrac{1}{2}+1)\hbar^2 = \tfrac{3}{4}\hbar^2$$

همان‌طور که اصل موضوع اول ایجاب می‌کند ، به‌دست می‌آیند (شکل ۶ـ۲) .



شکل (۶ـ۲) . کوانتش فضائی برای اسپین ذاتی ، $s = \frac{1}{2}$

گاهی اوقات مناسب است که عملگرهای اسپین را به‌صورت $\hat{S}_i = \frac{1}{2}\hbar\hat{\sigma}_i$ بیان کنیم که در آن

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad (۷-۶)$$

عبارتنداز ماتریسهای پاولی . این ماتریسها دارای خواص زیراند

$$\begin{aligned} [\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j] &= 2i\hat{\sigma}_k \\ [\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j]_+ &= 2\delta_{ij} \\ \sum_{i=1}^{3} \hat{\sigma}_i^{\,2} &= 3\hat{1}. \end{aligned} \qquad (۸-۶)$$

از (ب) نتیجه می‌شود که دوماتریس پاولی متفاوت پاد جابه‌جا پذیراند، یعنی $\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j = -\hat{\sigma}_j\hat{\sigma}_i$ ویژه بردارها و ویژه مقدارهای $\hat{S}_x$ و $\hat{S}_y$ می‌توانند (در ویژه پایهٔ $\hat{S}_z$) با استفاده از روشهای متداول ماتریسی به‌دست آیند . به‌عنوان مثال ، می‌توان مستقیماً" تحقیق کرد که

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{و} \quad \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

ویژه‌بردارهای $\hat{S}_x$ با ویژه مقدارهای $\frac{1}{2}\hbar$ و $-\frac{1}{2}\hbar$ هستند . ویژه بردارهای $\hat{S}_z$ ، که آنها را با $|m_s\rangle$ نمایش می‌دهیم یک پایه‌کامل راست‌هنجار تشکیل می‌دهند و هر کت اسپینی می‌تواند به‌وسیلهٔ

$$|\chi\rangle = \sum_{m_s=-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} a_{m_s}|m_s\rangle$$

نمایش داده شود . لازم نیست که ویژه کتها را با $|s, m_s\rangle$ نمایش دهیم زیرا برای یک‌ذره معین s همیشه مقدار ثابتی دارد (مثلاً" ، برای الکترون داریم $s = \frac{1}{2}$) .

حالا که نمایش اسپینی توسعه داده شد می‌خواهیم یک کت حالت کلی بسازیم که هم خواص فضائی و هم خواص اسپینی را با هم منعکس نماید . برای انجام این کار یک ضرب مستقیم* از کت فضائی و کت اسپینی ، یعنی ،

$$|\text{کلی}\rangle = |\text{فضائی}\rangle \otimes |\text{اسپینی}\rangle$$

---

* این ضرب مستقیم کتهای فضائی و اسپینی نباید با ضرب برداری معمولی اشتباه شود . ضرب مستقیم را ضرب تانسوری نیز می‌نامند .

تشکیل می‌دهیم ، فرض می‌شودکه تمام عملگرهای اسپینی با تمام عملگرهای فضائی (به‌عنوان مثال، با $\hat{\mathbf{L}}$ ، $\hat{\mathbf{r}}$ و $\hat{\mathbf{p}}$) جابه‌جاپذیراند . به‌علاوه ، عمل هرعملگر اسپینی روی $\langle$ کلی | قسمت فضائی‌را ثابت نگه می‌دارد وتنها روی قسمت اسپینی عمل می‌کند . عکس آن در مورد عملگرهای فضائی صادق است . یک ذره در یک میدان نیروی مرکزی (به‌عنوان مثال ، یک الکترون هیدرژنی) می‌تواند به‌وسیله یک کت کلی

$$|nlm_l m_s\rangle = |nlm_l\rangle \otimes |m_s\rangle \qquad (۶-۹)$$

نمایش داده شود ، که در آن اعداد کوانتومی جدید به‌اسپین ذره نسبت داده می‌شوند .این بردارهای کت دارای خواص زیراند

$$\begin{aligned}
&\mathscr{H}|nlm_l m_s\rangle = \varepsilon_{nl}|nlm_l m_s\rangle \\
&\hat{L}^2|nlm_l m_s\rangle = l(l+1)\hbar^2|nlm_l m_s\rangle \qquad (l = 0, 1, 2, \ldots) \\
&\hat{L}_z|nlm_l m_s\rangle = m_l\hbar|nlm_l m_s\rangle \qquad (m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm l) \\
&\hat{S}^2|nlm_l m_s\rangle = s(s+1)\hbar^2|nlm_l m_s\rangle \qquad (s = \tfrac{1}{2})
\end{aligned}$$

و

$$\hat{S}_z|nlm_l m_s\rangle = m_s\hbar|nlm_l m_s\rangle \qquad (m_s = \pm\tfrac{1}{2})$$

با

$$\langle n'l'm_l'm_s\,|nlm_l m_s\rangle = \delta_{nn'}\delta_{ll'}\delta_{m_l m_l'}\delta_{m_s m_s}$$

برای اختصار ، از این به‌بعد علامت $\otimes$ را حذف می‌کنیم و ضرب مستقیم را به‌صورت $\langle$ اسپین |$\langle$ فضا | می‌نویسیم . ویژه اسپینور (ویژه تابع به‌اضافهٔ اسپین) را با گرفتن حاصل ضرب داخلی $\langle$ کلی | با $|\mathbf{r}\rangle$ ایجاد می‌کنیم . چون برای اخیر یک ویژه‌برای فضائی است ، حاصل‌ضرب داخلی فقط روی قسمت فضائی تأثیر می‌کند و خواهیم داشت

$$\psi_{nlm_l m_s}(r) = \langle\mathbf{r}|nlm_l\rangle|m_s\rangle = \psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi)|m_s\rangle \qquad (۶-۱۰)$$

با به‌کاربردن ویژه پایه $\hat{S}_z$ برای $|m_s\rangle$ ، ویژه اسپینورهای " اسپین بالا " $(m_s = \frac{1}{2})$ و " اسپین پائین " $(m_s = -\frac{1}{2})$ به‌ترتیب به‌صورت

$$\psi_{nlm_l\pm} = \psi_{nlm_l}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\psi_{nlm_l}\\0\end{pmatrix} \qquad (۶-۱۱)$$

و

$$\psi_{nlm_l-\frac{1}{2}} = \psi_{nlm_l}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\ \psi_{nlm_l}\end{pmatrix}$$

به‌دست می‌آیند .

بدین‌ترتیب حالتهای نیروی مرکزی علاوه بر $2l+1$ تبهگنی فضائی اکنون دارای یک تبهگنی دوگانه ناشی از اسپین نیز می‌باشند . در مورد خاص هیدرژن ، تبهگنی تصادفی می‌شود

$$2\sum_{l=0}^{n-1} 2l+1 = 2n^2$$

برای مثال ، حالت پایه هیدرژن (پتانسیل کولنی) که در آن $\psi_{100\frac{1}{2}}$ و $\psi_{100-\frac{1}{2}}$ دارای انرژی $-13/6$ eV می‌باشند ، دوبار تبهگن است .

۲ ـ خواص تبدیل کتهای اسپینی ـ تکانه زاویه‌ای کل

در فصل ۳ خاطرنشان ساختیم که عملگر $\hat{p}_x$ مولد *انتقالهای* یک سیستم در امتداد محور x است . به‌همین طریق ، عملگر $\hat{L}_z$ مولد *دورانها* حول محور z است . درواقع می‌توان ثابت کرد که اگر ذره‌ای در یک حالت $|r,\theta,\phi\rangle$ ، یعنی دقیقا" در نقطه r ، θ و ϕ باشد ، عملگر $\exp(-i\hat{L}_z\bar{\phi}/\hbar)$ حالتی ایجاد می‌کند که در آن ذره به r ، θ و $\phi+\bar{\phi}$ چرخیده است . این عمل ازنظر ریاضی به‌صورت زیر بیان می‌شود

$$\exp(-i\hat{L}_z\bar{\phi}/\hbar)|r,\theta,\phi\rangle = |r,\theta,\phi+\bar{\phi}\rangle \qquad (۱۲-۶)$$

حالا یک کت فضائی دلخواه $|\alpha\rangle$ در نظر بگیریم . چون پایه $|nlm_l\rangle$ ، تا آنجا که به‌کتهای فضائی مربوط می‌شود ، کامل است ، می‌توان بسط زیر را انجام داد

$$|\alpha\rangle = \sum_{nlm_l} a_{nlm_l}|nlm_l\rangle$$

اگر سیستم اصلی را به‌اندازه $\bar{\phi}$ درجه حول محور z دوران دهیم ، حالت جدید خواهدشد

$$\begin{aligned}|\alpha'\rangle &= \exp(-i\hat{L}_z\bar{\phi}/\hbar)|\alpha\rangle\\ &= \sum_{nlm_l} a_{nlm_l}\exp(-im_l\bar{\phi})|nlm_l\rangle \qquad (m_l = 0, \pm1, \ldots, \pm l) \quad (۱۳-۶)\end{aligned}$$

فرض کنیم که دوران برابر $\bar{\phi} = 2\pi$ باشد در این صورت $e^{-im_l 2\pi} = 1$ و نتیجه می‌گیریم $|\alpha'\rangle = |\alpha\rangle$ ، همان‌طور که انتظار می‌رفت . بنابراین تک مقداری بودن به کت فضائی مربوط می‌شود .

برای تعمیم به‌اسپین ، مولد دوران (حول محور z) را به‌صورت $\exp(-i\hat{S}_z\bar{\phi}/\hbar)$ درنظر می‌گیریم . با تأثیر این عملگر روی یک کت اسپینی عمومی

$$|\chi\rangle = \sum_{m_s=\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} a_{m_s}|m_s\rangle$$

خواهیم داشت

$$|\chi'\rangle = \exp(-i\hat{S}_z\bar{\phi}/\hbar)|\chi\rangle = \sum_{m_s=-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} a_{m_s}\exp(-im_s\bar{\phi})|m_s\rangle \qquad (۱۴-۶)$$

چون m_s نیمه صحیح است ، یک دوران 2π کت اصلی را نمی‌دهد . در واقع یک دوران 4π لازم است تا $|\chi'\rangle = |\chi\rangle$ به‌دست آید . به‌این دلیل ، کتهای اسپینی گاهی اوقات "نیمه‌بردار" یا متداول‌تر ،اسپینور نامیده می‌شوند . یک اسپینور دلخواه تحت یک دوران 2π در $e^{-i\pi} = -1$ ضرب می‌شود . با این وجود ، چون احتمالات و مقادیر قابل انتظار ، حاصل ضربهای داخلی یا " مربعها " ی این اسپینورها را در بر دارند ، مشاهده‌پذیرها تحت دوران 2π بدون تغییر باقی می‌مانند* .

چون $\exp(-i\hat{L}_z\bar{\phi}/\hbar)$ و $\exp(-i\hat{S}_z\bar{\phi}/\hbar)$ به‌ترتیب قسمتهای فضائی و اسپینی کت کلی حالت را تبدیل می‌کنند ، نتیجه می‌شود

$$\begin{aligned} |\text{کلی}\,(\phi+\bar{\phi})\rangle &= \exp(-i\hat{L}_z\bar{\phi}/\hbar)\exp(-i\hat{S}_z\bar{\phi}/\hbar)|\text{total}(\phi)\rangle \\ &= \exp[-i(\hat{L}_z+\hat{S}_z)\bar{\phi}/\hbar]|\text{total}(\phi)\rangle \end{aligned} \qquad (۱۵-۶)$$

عبارت

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}} \qquad (۱۶-۶)$$

---

* اثر یک دوران 2π در (۶-۱۴) این است که یک ضریب‌فاز $e^{i\pi} = -1$ ایجاد می‌کند . با اینکه دلیل تجربی‌ای که پیشنهاد کند این ضریب فازمشاهده‌پذیر است وجود ندارد ،اما بحث در این مورد پایان نیافته است .

را به‌عنوان **عملگر تکانهٔ زاویه‌ای کل** تعریف می‌کنیم . در بخش بعدی خواهم دید که $\hat{\mathbf{J}}$ در بسیاری از مسائل با نیروی مرکزی اهمیت زیادی دارد . از (۶ـ۱۵) نتیجه می‌شود که $\exp(-i\hat{J}_z\bar{\phi}/\hbar)$ به‌طور همزمان هم برای ویژگیهای فضائی و هم برای ویژگیهای اسپینی دورانهائی حول محور z ایجاد می‌کند .

۳ ـ اسپین و مسئله نیروی مرکزی

برای گنجانیدن اسپین یک ذره در مسئله نیروی مرکزی ، هامیلتونی را به‌صورت حاصلضرب یک عملگر دیفرانسیلی در یک عملگر ماتریسی ، یعنی ،

$$\mathscr{H}_{\rm cf} \to \left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right\}\hat{1} = \begin{pmatrix} -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V)r) & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r) \end{pmatrix} \qquad (۱۷-۶)$$

می‌نویسیم که در آن $\hat{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ ماتریس یکه یا همانی است . قسمتهای دیفرانسیلی و ماتریسی به‌ترتیب روی قسمتهای فضائی و اسپینی کتهای حالت عمل می‌کنند . همان‌طورکه تا کنون نشان داده شده است ، مجموعه

$$|nlm_l m_s\rangle \to \psi_{nlm_lm_s} = \psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi)|m_s\rangle \qquad (۱۸-۶)$$

شامل ویژه تابعهای همزمان $\mathscr{H}_{\rm cf}$ ، $\hat{L}^2$ ، $\hat{L}_z$ ، $\hat{S}^2$ و $\hat{S}_z$ است . چون انرژی حداکثر به n و l بستگی دارد این حالتها تبهگن‌اند و ویژه حالتهای منحصر به‌فردی برای $\mathscr{H}_{\rm cf}$ نیستند . هر ترکیب خطی به‌صورت

$$|nl\rangle = \sum_{m_l=-l}^{l}\sum_{m_s=-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} a_{nlm_lm_s}|nlm_l m_s\rangle \qquad (۱۹-۶)$$

نیز یک ویژه حالت جدید و متمایز $\mathscr{H}_{\rm cf}$ با انرژی ε_{nl} می‌باشد (لم ۱ ، فصل ۳) .

نخست بررسی خواهیم کرد که آیا ویژه تابعهای همزمانی برای عملگرهای $\mathscr{H}_{\rm cf}$ ، $\hat{L}^2$ ، $\hat{S}^2$ ، $\hat{J}^2$ و $\hat{J}_z$ که در آن $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$ عملگر تکانهٔ زاویه‌ای کل مذکور در فوق است وجود دارند یا نه . برای انجام این کار کافی است مشاهده کنیم که پنج تا از عملگرهای فوق دوبه‌دو جابه‌جاپذیر ، و در نتیجه سازگاراند . به‌عنوان مثال ، چون $\mathscr{H}_{\rm cf}$ با مولفه‌های $\hat{\mathbf{L}}$ و

$\hat{S}$ جابه‌جاپذیر است ، نتیجه می‌گیریم

$$[\hat{J}^2, \mathscr{H}_{cf}] = [(\hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\hat{L}_x\hat{S}_x + 2\hat{L}_y\hat{S}_y + 2\hat{L}_z\hat{S}_z), \mathscr{H}_{cf}] = 0$$

و

$$[\hat{J}_z, \mathscr{H}_{cf}] = [(\hat{L}_z + \hat{S}_z), \mathscr{H}_{cf}] = 0$$

مولفه‌های $\hat{J}$ در روابط جابه‌جائی معمولی برای تکانه زاویه‌ای ، یعنی ،

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar\hat{J}_k \qquad (i, j, k = x, y, z) \qquad (۶-۲۰)$$

صدق می‌کنند (رک مسئله ۶-۷) . در آخر فصل ۵ ، با استفاده از جبر نردبانی ، نشان دادیم که عملگرهای برداری که مولفه‌های آنها در (۶-۲۰) صدق می‌کنند باید در معادلات ویژه مقداری

$$\hat{J}^2|jm_j\rangle = j(j+1)\hbar^2|jm_j\rangle \qquad (۶-۲۱ \text{ الف})$$

$$\hat{J}_z|jm_j\rangle = m_j\hbar|jm_j\rangle \qquad (|m_j| \leqslant j) \qquad (۶-۲۱ \text{ ب})$$

که در آنها $\hat{J}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2$ و اعداد کوانتومی می‌توانند یا صحیح یا نیمه‌صحیح باشند، صدق کنند .

سازگاربودن عملگرهای $\mathscr{H}_{cf}$ ، $\hat{L}^2$ ، $\hat{J}^2$ و $\hat{J}_z$ پیشنهاد می‌کند که یک مجموعه ویژه‌بردارهای مشترک وجود دارد که دارای خواص زیر هستند

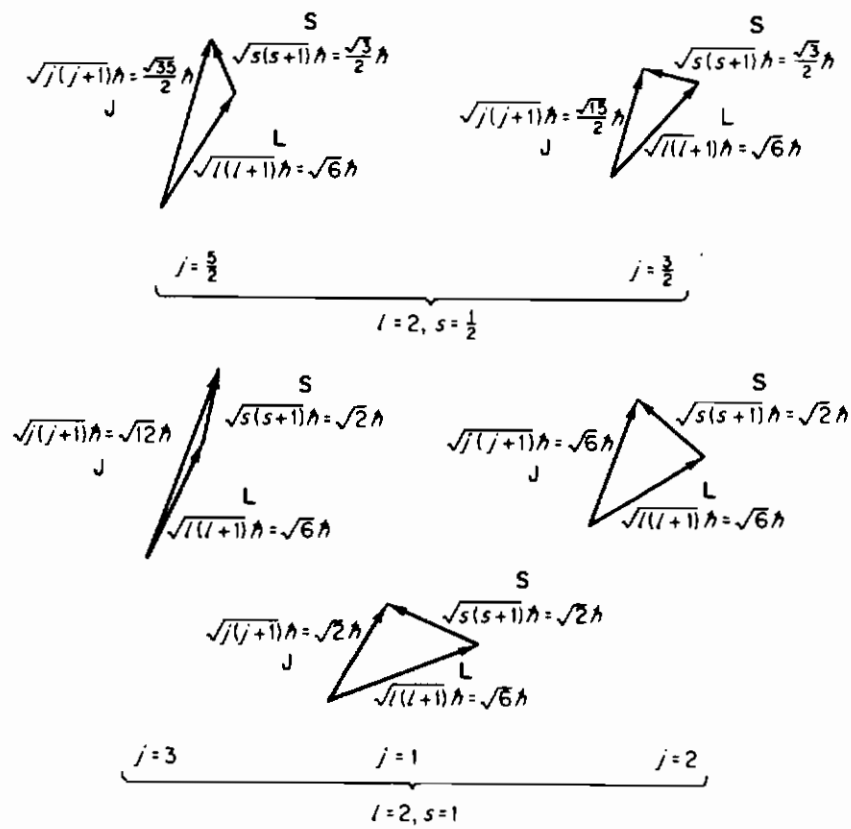
$$\begin{aligned}
\mathscr{H}_{cf}|nljm_j\rangle &= \varepsilon_{nl}|nljm_j\rangle \\
\hat{L}^2|nljm_j\rangle &= l(l+1)\hbar^2|nljm_j\rangle \qquad (l = 0, 1, 2, \ldots) \\
\hat{J}^2|nljm_j\rangle &= j(j+1)\hbar^2|nljm_j\rangle \\
\hat{J}_z|nljm_j\rangle &= m_j\hbar|nljm_j\rangle \qquad (|m_j| \leqslant j)
\end{aligned} \qquad (۶-۲۲)$$

این ویژه بردارها می‌توانند با استفاده از (۶-۱۹) ساخته شوند ، یعنی ،

$$|nljm_j\rangle = \sum_{m_l=-l}^{l} \sum_{m_s=-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} C^{nl}_{jm_jm_lm_s}|nlm_lm_s\rangle \qquad (۶-۲۳)$$

ضرایب موجود در (۶-۲۳) که ویژه حالتهای $\hat{L}_z$ و $\hat{S}_z$ را به‌ویژه‌حالتهای $\hat{J}^2$ و $\hat{J}_z$ ربط می‌دهند

نمونه‌هائی از ضرایب به‌اصطلاح **جمع برداری**، ضرایب‌کلبش ـ گردان[1]، یا ضرایب ویگنر[2]، هستند. برای یک مقدار معین l (و $s=\frac{1}{2}$)، تنها بعضی از ویژه حالتهای j^2 می‌توانند با استفاده از (۶ـ۲۳) ساخته شوند. برای پیداکردن مقادیر ممکن عدد کوانتومی j از یک کمک نیمه کلاسیکی معروف به‌مدل برداری (شکل ۶ـ۳) استفاده می‌کنیم. این مدل بر پایه قاعده مثلثی برای جمع برداری استوار است و پیشگوئی می‌کند که مقادیر j محدود به



شکل (۶ـ۳) کاربرد مدل برداری به‌منظور ایجاد حالتهای j^2 $(\mathbf{J}=\mathbf{L}+\mathbf{S})$ برای موارد $l=2, s=\frac{1}{2}$ و $l=2$، $s=1$.

$|l-s|\leqslant j\leqslant l+s$ باشد یا در مورد الکترون که $s=\frac{1}{2}$ است، $j=l\pm\frac{1}{2}$ باشد. ماشرط می‌کنیم که j غیر منفی است و وقتی $l=0$ است j را $\frac{1}{2}$ اختیاری می‌کنیم، $j=\frac{1}{2}$. چون j برای الکترون نیمه‌صحیح است، m_j نیز نیمه‌صحیح و محدود به‌مقادیر

$$m_j=\pm\tfrac{1}{2},\ \pm\tfrac{3}{2},\ \ldots,\ \pm j$$

1- clebsh - gordan 2- Wigner

است .

با اینکه نظریه گروهها محاسبات را ساده می‌کند ولی محاسبه ضرایب کلبش گردان در (۶ـ۲۳) مشکل است . در مسئله موردنظر ، برای $s = \frac{1}{2}$ و l دلخواه ، می‌توان نشان داد که ضرایب کلبش گردان می‌دهد

$$\left|nljm_j\right\rangle = \left|n, l, l \pm \frac{1}{2}, m_j\right\rangle$$
$$= \frac{1}{(2l+1)^{1/2}} \left\{ \pm \left(l \pm m_j + \frac{1}{2}\right)^{1/2} \left|n, l, m_j - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle \right.$$
$$\left. + \left(l \mp m_j + \frac{1}{2}\right)^{1/2} \left|n, l, m_j + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle \right\} \qquad (۶-۲۴)$$

یا ،از (۶ـ۱۱) در مکانیک موجی ، ویژه تابعها عبارتنداز

$$\psi_{nll\pm\frac{1}{2}m_j} = \frac{R_{nl}(r)}{(2l+1)^{1/2}} \begin{pmatrix} \pm(l \pm m_j + \frac{1}{2})^{1/2} Y_l^{m_j - 1/2}(\theta, \phi) \\ (l \mp m_j + \frac{1}{2})^{1/2} Y_l^{m_j + 1/2}(\theta, \phi) \end{pmatrix} \qquad (۶-۲۵)$$

بنابراین ، به‌عنوان مثال ، ویژه تابع برای $n = 2$ ، $l = 1$ ، $j = l + \frac{1}{2} = \frac{3}{2}$ و $m_j = \frac{1}{2}$ خواهد بود

$$\psi_{2,1,3/2,1/2}(r, \theta, \phi) = \frac{R_{21}(r)}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} \sqrt{2} & Y_1^0(\theta, \phi) \\ \sqrt{1} & Y_1^1(\theta, \phi) \end{pmatrix} \qquad (۶-۲۶)$$

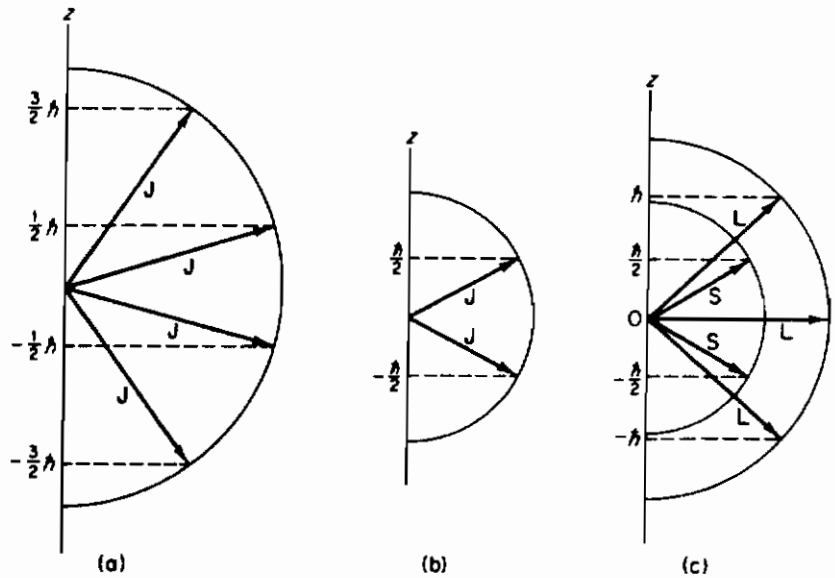
در مواقعی که اقتضا کند یک حالت هیدرژنی از نوع $|nljm_j\rangle$ را با

$$^{2s+1}x_j = {}^2x_j \qquad (۶-۲۷)$$

نمایش خواهیم داد که در آن x یک حرف قراردادی طیف نمائی وابسته به‌مقدار l است . به‌عنوان مثال ، حالت (۶ـ۲۶) یک حالت $^2s_{\frac{1}{2}}$ است . حالت پایه (دوبار تبهگن) هیدرژن ($n = 1$ ، $l = 0$ و $j = \frac{1}{2}$ و $m_j = \pm\frac{1}{2}$) یک حالت $^2p_{\frac{1}{2}}$ است .

شایان توجه است که تبهگنی‌تر از ε_{nl} ، چه $|m_l m_s\rangle$ و چه $|jm_j\rangle$ را به‌کاربریم ،یکسان است . به‌عنوان مثال ، تراز ε_{21} در طرحواره $|nlm_l m_s\rangle$ شش‌بار ، یعنی $2(2l+1)$ بار،تبهگن است .این حالتها می‌توانند باهم ترکیب شوند و منجر به $j = l + \frac{1}{2} = \frac{3}{2}$ و $j = l - \frac{1}{2} = \frac{1}{2}$ گردند .حالت‌اول $2j + 1 = 4$ بار تبهگن است (یعنی ، $m_j = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}$)، در

صورتی که حالت دوم دوبار تبهگن است . تبهگنی کل بازهم ، همان‌طور که انتظار می‌رود، شش است (شکل ۶ـ۴) .



شکل (۶ـ۴) شش حالت تبهگن برای $l=1, s=\frac{1}{2}$ در طرحواره‌های $|jm_j\rangle$ و $|m_l m_s\rangle$. (الف) $|l+s|=j=\frac{3}{2},\ |\mathbf{J}|=(\sqrt{15}/2)\,\hbar,\ m_j=\pm\frac{1}{2},\pm\frac{3}{2}$ (ب) $|l-s|=j=\frac{1}{2},\ |\mathbf{J}|=(\sqrt{3}/2)\,\hbar,\ m_j=\pm\frac{1}{2}$ (ج) $m_l=0,\pm 1,\quad m_s=\pm\frac{1}{2}$.

تبهگنی‌های فضائی (m_l) و اسپینی (m_s) یک هامیلتونی نیروی مرکزی منجر به ابهاماتی در برچسب زدن ویژه‌حالتها می‌شوند . همان‌طورکه‌دیدیم یک‌مجموعه به‌صورت $|nlm_l m_s\rangle$ نشان داده می‌شود و شامل ویژه حالتهای همزمان $\hat{\mathscr{H}}_{cf},\ \hat{L}^2,\ \hat{L}_z$ و $\hat{S}_z$ می‌باشد درصورتی که مجموعه دیگر به‌صورت $|nljm_j\rangle$ نمایش داده می‌شود و شامل ویژه کتهای همزمان $\hat{\mathscr{H}}_{cf}$ ، $\hat{L}^2, \hat{J}^2$ و $\hat{J}_z$ است . به‌عنوان مثال ، چون $\hat{J}^2$ و $\hat{L}_z$ ناسازگاراند ، این دومجموعه‌متمایزاند . بنابراین باید تصریح کنیم که کدام مجموعه را مورد بررسی قرار می‌دهیم .

۴ ـ مغناطیس اسپینی و برهم کنش اسپین ـ مدار در هیدرژن

هر ذره‌ای که اسپین ذاتی داشته باشد دارای یک گشتاور دوقطبی مغناطیسی است ودر یک میدان مغناطیسی انرژی کسب می‌کند . این گشتاور دوقطبی نمی‌تواند به‌طور کلاسیکی محاسبه شود و باید در مقایسه با (۵ـ۸۳) با یک *اصل موضوع* به‌صورت

$$\boldsymbol{\mu}_s = g_s \frac{q}{2mc}\,\mathbf{S} \qquad (۶-۲۸)$$

داده شود که در آن q ، m و $\mathbf{S}$ به‌ترتیب بار، جرم و تکانهٔ زاویه‌ای اسپین ذره و c سرعت نور است . ضریب تناسب g_s ضریب اسپینی " g " نامیده می‌شود . براساس داده‌های تجربی برای الکترون داریم $g_s \simeq 2.0023 \simeq 2$

انرژی کسب‌شده به‌وسیله این دوقطبی در یک میدان مغناطیسی عبارت است از $E_{mag} = -\boldsymbol{\mu}_s \cdot \mathbf{B}$. حتی در غیاب یک میدان خارجی ، یک الکترون که در یک پتانسیل نیروی مرکزی دور می‌زند تحت تأثیر یک میدان داخلی که آنرا $\mathbf{B}_{orbit}$ می‌نامیم قرارمی‌گیرد و هامیلتونی مربوط به‌این مسئله می‌شود

$$\mathscr{H} = \mathscr{H}_{cf} - \boldsymbol{\mu}_s \cdot \mathbf{B}_{orbit} \qquad (۲۹-۶)$$

جمله آخر اساسا" از برهم کنش بین حرکت مداری ذره و اسپین ذاتی آن ناشی می‌شود .

از الکترودینامیک کلاسیکی می‌دانیم که وقتی یک ذره باردار با سرعت $\mathbf{v}$ در داخل یک میدان الکتریکی $\mathbf{E}$ حرکت می‌کند ، ناظری که همراه با ذره حرکت می‌کند یک میدان مغناطیسی القائی*

$$\mathbf{B}_{orbit} = \mathbf{B}_{ind} \simeq -\frac{\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{E} \qquad (۳۰-۶)$$

اندازه می‌گیرد . فرض خواهیم‌کرد که ذره در داخل یک پتانسیل الکتروستاتیکی‌نیروی‌مرکزی به‌صورت $V(r) = q\Phi(r)$ حرکت می‌کند . لذا قرار می‌دهیم

$$\mathbf{E} = -\nabla\Phi(r) = -\frac{d\Phi}{dr}\frac{\mathbf{r}}{r} \qquad (۳۱-۶)$$

اما ، چون الکترون شتاب دارد ، دستگاه متصل به‌آن لخت نیست و در صورتی‌که بخواهیم به‌طور دقیق انرژی اسپین ــ مداری را پیشگوئی کنیم باید تصحیحات را منظور کنیم . بدون اثبات توضیح می‌دهیم که یک تبدیل نسبیتی به‌دستگاه الکترون ، یک حرکت اضافی به نام حرکت تقدیمی ــ تامسون *وارد* می‌کند**. این حرکت یک ضریب $\frac{1}{2}$ در عبارت انرژی دوقطبی

---

* به‌عنوان مثال به‌کتاب زیر مراجعه کنید

J.K. Jackson, "Classical Electrodynamics",PP. 380-383, wiley, New-York,1962.

**برای بحث مقدماتی در بارهٔ حرکت تقدیمی تامسون به‌کتاب زیر مراجعه کنید

R.M. Eisberg, "Fundamentals of Modern physics," P. 340. Wiley,New York,1960.

مغناطیسی وارد می‌کند . انرژی وابسته به‌مغناطیس مداری در این صورت عبارت است از

$$-\mu_s \cdot \mathbf{B}_{\text{orbit}} = +\mu_s \cdot \frac{1}{2}\left(\frac{\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{E}\right) \qquad (۳۲-۶)$$

که در آن ضریب $\frac{1}{2}$ از حرکت تقدیمی تامسون ، که یک اثر نسبیتی است ، ناشی می‌شود . با استفاده از (۶ـ۳۱) و (۶ـ۳۲) نتیجه می‌گیریم که هامیلتونی (۶ـ۲۹) خواهد شد

$$\begin{aligned}\mathscr{H} &= \mathscr{H}_{\text{cf}} + \tfrac{1}{2}\mu_s \cdot \left(\frac{\mathbf{v}}{c} \times -\frac{d\Phi}{dr}\frac{\mathbf{r}}{r}\right)\\ &= \mathscr{H}_{\text{cf}} - \frac{1}{2qmc}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\,\boldsymbol{\mu}_s \cdot (m\mathbf{v} \times \mathbf{r}) \qquad (V = q\Phi)\\ &= \mathscr{H}_{\text{cf}} + \frac{1}{2qmc}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\,\boldsymbol{\mu}_s \cdot \mathbf{L}. \qquad (۳۳-۶)\end{aligned}$$

سپس حالت عمومی‌تری را که در آن سیستم با نیروی مرکزی در داخل یک میدان مغناطیسی یکنواخت خارجی $\mathbf{B}$ قرار داشته باشد در نظر می‌گیریم . برهم کنش با این‌میدان هم دوقطبی مغناطیسی مداری را درگیر می‌کند و هم دوقطبی مغناطیسی‌اسپینی‌را. هامیلتونی می‌شود

$$\mathscr{H} = \mathscr{H}_{\text{cf}} + \frac{1}{2qmc}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\,\boldsymbol{\mu}_s \cdot \mathbf{L} - \boldsymbol{\mu}_l \cdot \mathbf{B} - \boldsymbol{\mu}_s \cdot \mathbf{B}$$

یا با استفاده از (۵ـ۸۳)و (۶ـ۲۸) هامیلتونی مکانیک کوانتومی به‌صورت زیر در می‌آید

$$\mathscr{H} = \mathscr{H}_{\text{cf}} + \frac{g_s}{(2mc)^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\,\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{L}} - \frac{qg_l}{2mc}\,\hat{\mathbf{L}} \cdot \mathbf{B} - \frac{qg_s}{2mc}\,\hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{B} \qquad (۳۴-۶)$$

جمله‌های رابطه (۶ـ۳۴) به‌ترتیب عبارتنداز انرژی نیروی مرکزی ، انرژی برهم‌کنش "اسپین مدار" ، انرژی گشتاورهای مغناطیسی مداری و اسپینی در میدان خارجی . برای الکترون هیدرژنی ،قرار می‌دهیم $q = -e$ ، $V = -e^2/r$ ، $g_l = 1$ و $g_s = 2$. در این صورت معادله (۶ـ۳۴) می‌شود

$$\mathscr{H} = \mathscr{H}_{\text{cf}} + \frac{e^2}{2m^2c^2}\frac{1}{r^3}\,\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{L}} + \frac{e}{2mc}\,\hat{\mathbf{L}} \cdot \mathbf{B} + \frac{e}{mc}\,\hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{B} \qquad (۳۵-۶)$$

که در آن

$$\mathscr{H}_{\rm cf} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r}$$

۵ ــ میدانهای مغناطیسی خارجی ــ اثر پاشن ــ باک

جستجوی ویژه جوابهای دقیق هامیلتونی کاملا" عمومی (۶ــ۳۵) نومیدکننده است. با این وجود، دومورد که ازنظر عملی اهمیت دارند وجود دارد که در خور بررسی است. مورد اول موردی است که در آن میدان خارجی آنقدر ضعیف (در مقایسه با $\mathbf{B}_{\rm orbit}$) است که انرژی اسپین ــ مدار خیلی بزرگتر از انرژی برهم کنش با $\mathbf{B}$ است. این اثر به *اثر غیرعادی زیمن* موسوم است و برای اتم هیدرژن وقتی اتفاق می‌افتد که برای میدان خارجی داشته باشیم

$$B \ll B_{\rm orbit} \simeq \frac{e}{c}\frac{v}{r^2} \simeq 10^4 \quad \text{gauss}$$

حتی در این مورد فقط جوابهای تقریبی ممکن هستند و ما بحث اثر غیرعادی زیمن را به فصل بعد (روشهای تقریبی) موکول می‌کنیم.

مورد دیگر برای میدانهای قوی*، وقتی $B \gg B_{\rm orbit}$ باشد، اتفاق می‌افتد. مورد میدان قوی *اثر پاشن ــ باک* نامیده می‌شود. در اینجا در تقریب مرتبه اول از برهم‌کنش اسپین ــ مدار کاملا" صرفنظر می‌شود. هامیلتونی پاشن ــ باک، که ویژه حالتهای آنرا جستجو می‌کنیم، عبارت است از

$$\mathscr{H}_{\rm PB} = \mathscr{H}_{\rm cf} + \frac{eB}{2mc}(\hat{L}_z + 2\hat{S}_z) \qquad (۶-۳۶)$$

محور z را طوری انتخاب کرده‌ایم که منطبق بر امتداد $\mathbf{B}$ باشد. مشاهده می‌کنیم که هامیلتونیهای پاشن ــ باک و نیروی مرکزی جابه‌جاپذیراند، یعنی،

$$[\mathscr{H}_{\rm PB}, \mathscr{H}_{\rm cf}] = 0$$

که بیان می‌کند دو هامیلتونی دارای یک مجموعه ویژه‌حالتهای مشترک هستند. با فرض اینکه

---

* حتی در اینجا نیز $\mathbf{B}$ آنقدر کوچک فرض می‌شود (یعنی، $|\mu \cdot \mathbf{B}| \ll \mathscr{H}_{\rm cf}$) که بتوان از اثرهایی که از توان دوم $\mathbf{B}$ هستند صرفنظر کرد.

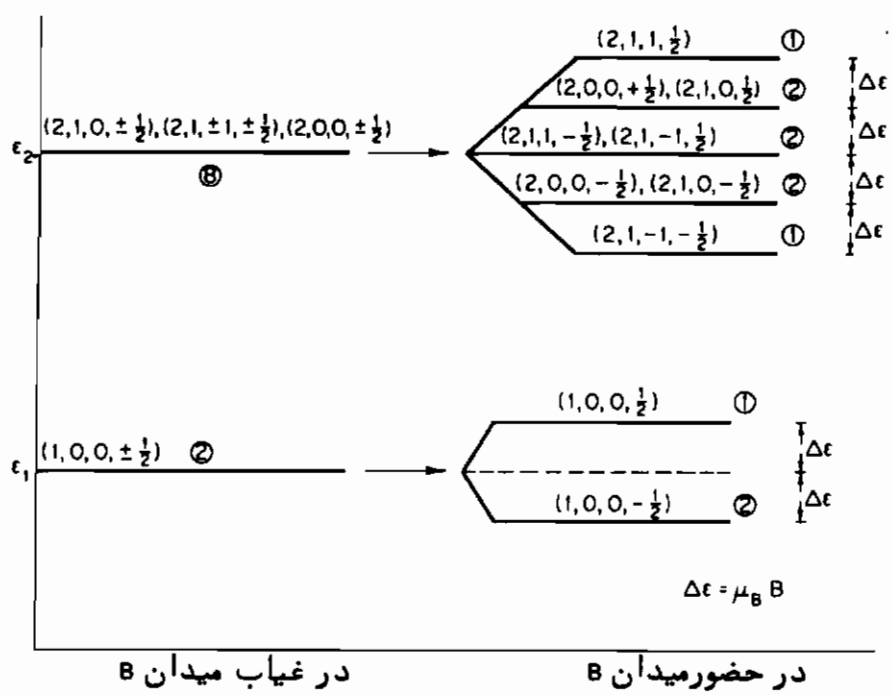
این مجموعه حالتها به‌صورت $|nlm_l m_s\rangle$ باشند می‌نویسیم

$$\mathscr{H}_{\mathrm{PB}}|nlm_l m_s\rangle = \left\{\mathscr{H}_{\mathrm{cf}} + \frac{eB}{2mc}(\hat{L}_z + 2\hat{S}_z)\right\}|nlm_l m_s\rangle$$
$$= \left\{\varepsilon_{nl} + \frac{eB}{2mc}(m_l + 2m_s)\hbar\right\}|nlm_l m_s\rangle \qquad (۳۷-۶)$$

بنابراین فرض ما توجیه می‌شود . در حالی که $\psi_{nlm_lm_s}$ ویژه تابعهای دقیق $\mathscr{H}_{\mathrm{PB}}$ هستند*، ویژه مقدارهای انرژی جابه‌جا می‌شوند و به‌صورت زیر در می‌آیند

$$\varepsilon_{nlm_lm_s} = \varepsilon_{nl} + \mu_{\mathrm{B}} B(m_l + 2m_s) \qquad (۳۸-۶)$$

شکافتگی زیر سطوح مغناطیسی در هیدرژن در شکل (۶ــ۵) نمایش داده شده است .



شکل (۶ــ۵) شکافتگی ترازهای بوهر در هیدرژن در حضور یک میدان قوی B (اثر پاشن ــ باک) . حالتها به‌وسیله مقادیر (n, l, m_l, m_s) مشخص شده‌اند و اعداد درون دایره بیانگر درجه تبهگنی هستند .

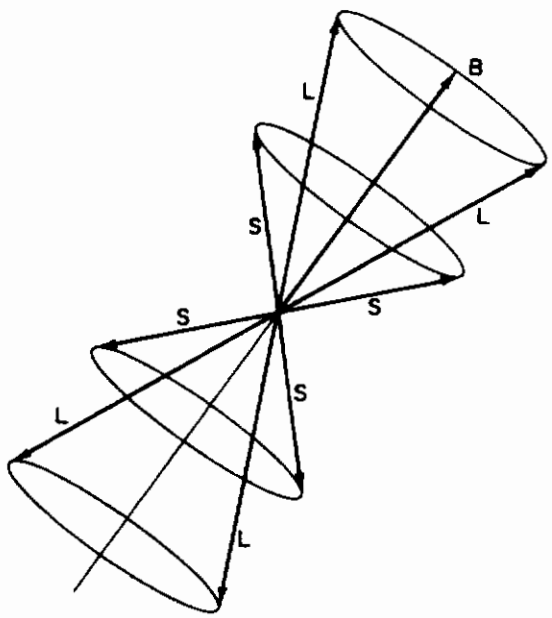
---

* توجه کنید که این هامیلتونی تنها یک تقریب است زیرا از برهم‌کنش اسپین ــ مدار صرفنظر کرده‌ایم .

یک محاسبه ساده نشان می‌دهد که

$$[\hat{J}^2, \mathscr{H}_{PB}] \neq 0$$

بنابراین ، کتهای $|nljm_j\rangle$ ، که ویژه کتهای $\hat{J}^2$ و $\hat{J}_z$ هستند ، مسلما" معرف ویژه حالتهای $\mathscr{H}_{PB}$ نیستند . برای میدانهای قوی ، فقط $\hat{L}^2, \hat{S}^2, \hat{L}_z$ و $\hat{S}_z$ کوانتیده (دقیق) هستند : در تصویر کلاسیکی L و S به‌طور مستقل حول B حرکت تقدیمی انجام می‌دهند (شکل ۶ـ۶)



شکل (۶ـ۶) "حرکت تقدیمی" آماری مستقل L و S حول B در مورد میدان قوی (اثر پاشن ـ باک)

آنچه که ما انجام داده‌ایم کاهش تقارن به‌وسیله اعمال یک میدان مغناطیسی قوی روی سیستم است . این عمل تبهگنی فضائی یک مسئله نیروی مرکزی را از بین می‌برد . در این صورت ویژه‌تابعها منحصر به‌فرداند به‌طوری که تنها مجموعه $|nlm_lm_s\rangle$ (ونه $|nljm_j\rangle$) یک ویژه پایه برای $\mathscr{H}$ تشکیل می‌دهد .

وجود اسپین ذاتی به‌طور اعجاب‌انگیزی به‌وسیله آزمایش اشترن ـ گرلاخ آشکار شد . این نظریه به‌صورتی که توسط گودشمیت و اوهلنبک پیشنهاد شد و کمی بعد توسط پاولی فرمولبندی گردید بسیاری از جنبه‌های طیف گسیلی اتمها را توضیح داد . با این وجود ، از دیدگاه ادراکی ، این روش اصل موضوعی اسپین قانع‌کننده نیست . در فصل ۱۱ خواهیم‌دید که لازم نیست وجود اسپین‌ذاتی برای الکترون را به‌صورت یک اصل وضع کنیم . در واقع ، نشان خواهیم دادکه اسپین به‌طورکاملا" طبیعی ازمکانیک‌کوانتومی ونظریهٔ نسبیت اینشتین

حاصل می‌شود . معادله نسبیتی کوانتومی الکترون ، مشابه معادله شرودینگر ، معادله دیراک نامیده می‌شود . در حد $v \ll c$ ، معادله نسبیتی دیراک به‌معادله غیرنسبیتی شرودینگر، که *شامل اسپین* است ، تقلیل می‌یابد .بنابراین ، وجود پدیده اسپین ذاتی می‌تواند به‌عنوان نتیجه مستقیم مکانیک کوانتومی نسبیتی در نظر گرفته شود .

با مطالعه یک گروه از مسائل فیزیکی ، نتیجه خواهیم گرفت که جواب صحیح غالبا " خارج از گستره امکانات ریاضی است . یک مورد مهم که قبلا" نیز به‌آن اشاره شده است مورد هیدرژن با برهم‌کنش اسپین ــ مدار است . خوشبختانه در بسیاری از موارد هامیلتونی مورد نظرتفاوت بسیارکمی با یک هامیلتونی که ویژه جوابهای دقیق آن شناخته شده‌است ، دارد. اختلاف‌کوچک بین این دو هامیلتونی پریشیدگی نامیده می‌شود . به‌دست‌آوردن تصحیحات لازم در مورد ویژه تابعها و ویژه مقدارها موضوع نظریه پریشیدگی است که در فصل ۷ مورد بحث قرار خواهد گرفت .

مسائل

۶ــ۱ (الف) با استفاده از مقایسه با الکتروستاتیک ، نشان دهید که مولفه z نیروی‌وارد بر یک دوقطبی مغناطیسی در یک میدان مغناطیسی غیریکنواخت عبارت است از

$$F_z = \mu_x \frac{\partial B_z}{\partial x} + \mu_y \frac{\partial B_z}{\partial y} + \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z}$$

(ب) با فرض $B_z \gg B_x, B_y$ و اینکه دوقطبی به‌طور "فضائی" در امتدادمحور z کوانتیده است ، با اثبات $\langle \mu_x \rangle = \langle \mu_y \rangle = 0$ نشان دهید

$$\langle F_z \rangle = \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z} = -\frac{eh}{2mc} m \frac{\partial B_z}{\partial z}$$

(چرا برای اینکه رابطه مربوط به $\langle F_z \rangle$ برقرار باشد باید B_x و B_y وجود داشته‌باشند؟)

۶ــ۲ خواص ماتریسهای پاولی را برای اسپین ، معادلات (۶ــ۸) ، تحقیق کنید .

۶ــ۳ (الف) ویژه بردارهای (در ویژه پایه $\hat{S}_z$) ذره‌ای را که مولفه‌های اسپین آن در روی محور x به‌ترتیب $\pm\frac{1}{2}\hbar$ است پیدا کنید .

(ب) اگر ذره در یک حالت کوانتومی ، که در آن تصویر اسپین روی محور x دقیقا "

$\frac{1}{2}\hbar$ است ، باشد احتمال پیداکردن آن با مولفه $\frac{1}{2}\hbar$ روی محور z چقدر است ؟

۶ـ۴ با استفاده از ماتریسهای مناسب مستقیما" نشان دهید که اگر سیستم در یکی از ویژه حالتهای $\hat{S}_z$ باشد داریم $\langle S_x \rangle = \langle S_y \rangle = 0$

۶ـ۵ (الف) ماتریسهای $\hat{S}_x$ ، $\hat{S}_y$ و $\hat{S}_z$ (در ویژه پایه $\hat{S}_z$) را برای ذره‌ای که مولفه‌های اسپین آن به‌صورت $+\hbar, 0, -\hbar$ کوانتیده‌اند بسازید .

(ب) عملگر $\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2$ را بسازید و تحقیق کنید که ویژه مقدارهای آن عبارتند از $s(s+1)\hbar^2 = 1(1+1)\hbar^2 = 2\hbar^2$

۶ـ۶ شکل عملگر یکانی‌ای که حالت فیزیکی کل را به‌اندازه $\bar{\phi}$ رادیان حول یک‌محور دلخواه که به‌وسیله برداریکه $\mathbf{n}$ مشخص شده است دوران دهد به‌دست آورید .

۶ـ۷ ثابت کنید که مؤلفه‌های $\mathbf{J}$ در رابطه زیر صدق می‌کنند .

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar \hat{J}_k$$

۶ـ۸ ثابت کنید که تابع داده شده در معادله (۶ـ۲۵) یک ویژه تابع $\hat{J}_z = \hat{L}_z + \hat{S}_z$ است .

۶ـ۹ ذره‌ای با اسپین $s = \frac{1}{2}$ درحالت مداری $l = 2$ در نظر بگیرید . نشان دهیدکه‌تبهگنی تراز در دو طرحواره $|m_l m_s\rangle$ و $|jm_j\rangle$ یکسان است .

۶ـ۱۰ ضریب ژیرومغناطسی اسپین برای یک پروتون $(s = \frac{1}{2})$ عبارت است از $g_s^{(p)} = 5.59$.

(الف) گشتاور دوقطبی مغناطیسی پروتون را پیدا کنید .

(ب) تصویرهای این گشتاور را در امتداد یک میدان مغناطیسی‌یکنواخت B_z پیدا کنید .

(ج) با فرض اینکه یک هسته می‌تواند به‌وسیله یک پروتون تک که در یک پتانسیل نیروی مرکزی حرکت می‌کند نمایش داده شود ، طبیعت شکافتگی ترازهای انرژی در یک میدان مغناطیسی قوی را به‌طور کیفی بحث کنید .

مراجع پیشنهادی

Bohm, D., "Quantum Theory," Chapter 17. Prentice-Hall, Englewood-Cliffs, New Jersey, 1951.

Eisberg, R. M., "Fundamentals of Modern Physics," Chapter 11. Wiley, New York, 1961.

Jackson, J. D., "Classical Electrodynamics," Chapter 11. Wiley, New York, 1962.

Merzbacher, E., "Quantum Mechanics," 2nd ed. Chapter 12. Wiley, New York, 1970.

Saxon, D., "Elementary Quantum Mechanics," Chapter 10. Holden-Day, San Francisco, 1968.

Stehle, P., "Quantum Mechanics," Chapter 4. Holden-Day, San Francisco, 1966.

۷

روشهای تقریبی

۱ ــ نظریه پریشیدگی

درفصلهای پیشین سیستمهای *ایده‌آل شده‌ای* را ، که برای آنها پیداکردن‌ویژه‌تابعهای دقیق انرژی امکان‌پذیربود ،بررسی کردیم .متاسفانه، پیچیدگیهای‌طبیعت به‌هامیلتونی‌هائی منجر می‌شوند که برای آنها جواب دقیق امکان‌پذیر نیست . در بسیاری از وضعیتهای‌فیزیکی تصحیحات لازم برای بعضی از سیستمهای ایده‌آل شده نسبتا" کوچک‌اند . به‌عنوان مثال ، خواهیم دید که برهم‌کنش اسپین ــ مدار در هیدرژن ما را به‌تصحیحات کسری از مرتبه $\sim 10^{-4}$ در ترازهای بوهر می‌کشاند . در این موارد ویژه تابعهای تقریبی انرژی می‌توانند به‌وسیله روشهای تقریبی گوناگونی به‌دست آیند .

هامیلتونی‌ای که ما در نظر خواهیم گرفت به‌صورت عمومی

$$\mathscr{H} = \mathscr{H}_0 + \lambda \mathscr{V}$$

است که در آن $\mathscr{H}_0$ هامیلتونی ناپریشیده و $\lambda \mathscr{V}$ پریشیدگی‌است .قسمت اخیر ، برای سهولت به‌یک پارامتر "کوچک" λ ویک‌تابع پریشیدگی $\mathscr{V}(\hat{r}, \hat{p})$ تجزیه شده‌است . پریشیدگی‌رامی‌توان با دو روش اساسا" متفاوت بررسی کرد . روش نخست ، که *نظریه حالت مانا* نامیده می‌شود، به‌تصحیحات در ویژه تابعها و ویژه مقدارهای انرژی ناپریشیده $\mathscr{H}_0$ می‌پردازد . این روش وقتی به‌کار می‌رود که هامیلتونی کل (پریشیده) از نظر فیزیکی در درجه اول اهمیت قرار دارد .این نظریه ،به‌عنوان مثال ، می‌تواند برای‌محاسبه‌تصحیحات‌ترازهای انرژی هیدرژن که از برهم‌کنش اسپین ــ مدار ناشی می‌شوند به‌کار رود .

دیدگاه دوم ، به‌نام *نظریه پریشیدگی وابسته به‌زمان* ، وقتی به‌کار می‌رودکه هامیلتونی ناپریشیده دارای اهمیت اساسی است . چون $\mathscr{H}_0$ هامیلتونی کامل نیست (بدون $\lambda \mathscr{V}$)، ویژه

حالتهای آن مانا نیستند. بخصوص، اگرسیستم درآغاز $(t = t_0)$ دریک ویژه‌حالت ناپریشیده ـ مثلاً $|\varepsilon_i^0\rangle$ ـ باشد در یک زمان بعدی طبق قاعده زیر تحول پیدا خواهد کرد

$$|\beta_i, t\rangle = \exp[-i\mathscr{H}(t - t_0)/\hbar]|\varepsilon_i^0\rangle = \exp[-i(\mathscr{H}_0 + \lambda\hat{V})(t - t_0)/\hbar]|\varepsilon_i^0\rangle$$

که در آن یک پریشیدگی، $\hat{V}$ ، مستقل از زمان در نظر گرفته‌ایم. طبق اصول موضوع مکانیک کوانتومی، احتمال مشاهده سیستم در یک ویژه حالت ناپریشیده دیگر $|\varepsilon_j^0\rangle$ در زمان دیرتر t عبارت است از

$$\mathscr{P}_{ij}(t) = |\langle\varepsilon_j^0|\beta_i, t\rangle|^2$$

کمیت $d\mathscr{P}_{ij}(t)/dt$ آهنگی است که سیستم با آن "گذارهائی" را از حالت i ام به‌حالت j ام در اثر پریشیدگی انجام می‌دهد. بنابراین، پریشیدگی در اینجا به‌عنوان عاملی در نظر گرفته می‌شود که باعث گذارهای سیستم بین ویژه حالتهای ناپریشیده $\mathscr{H}_0$ می‌شود. آهنگ گذار ارتباط نزدیکی به‌مقطع موثر پراکندگی دارد. نخست با بحث نظریه پریشیدگی مانا شروع می‌کنیم.

۲ ـ نظریه پریشیدگی مانای حالت مقید ناتبهگن (روش رالی ـ شرودینگر)*

فرض خواهیم کرد که هامیلتونی ناپریشده ناتبهگن باشد. این بدان معنی است که ویژه حالتها یکتا هستند و می‌توانیم یک تناظر یک به‌یک بین ویژه حالتهای پریشیده $|\varepsilon_i\rangle$ و ناپریشیده $|\varepsilon_i^0\rangle$ برقرار کنیم. بنابراین می‌توانیم بنویسیم

$$\mathscr{H}_0|\varepsilon_i^0\rangle = \varepsilon_i^0|\varepsilon_i^0\rangle \qquad (۱-۷)$$

و

$$\mathscr{H}|\varepsilon_i\rangle = (\mathscr{H}_0 + \lambda\hat{V})|\varepsilon_i\rangle = \varepsilon_i|\varepsilon_i\rangle \qquad (۲-۷)$$

که در آن $|\varepsilon_i\rangle \xrightarrow[\lambda\to 0]{} |\varepsilon_i^0\rangle$. تأکید می‌کنیم که این شرط محدودکننده‌تنها درمورد هامیلتونی‌های ناتبهگن یکتا است. ما هم چنین بحث خود را به‌پریشیدگی حالتهای مقید (گسسته) محدود می‌کنیم.

---

* این روش اصالتاً به‌رالی، که آن را به‌نظریه صوت اعمال کرد، منسوب است. بعداً این روش به‌وسیله شرودینگر به‌نظریهٔ کوانتومی اعمال شد.

می‌توان جواب (۷ـ۲) را به‌صورت یک سری پریشیدگی* از توانهای λ بسط داد. اما آهنگ همگرائی این سری به‌میزان کوچکی λ بستگی دارد.

فرض خواهد شدکه ویژه‌بردارها و ویژه مقدارهای پریشیده می‌توانند به‌صورت سریهائی به‌شکل

$$|\varepsilon_i\rangle = |\varepsilon_i{}^0\rangle + \lambda|\varepsilon_i^{(1)}\rangle + \lambda^2|\varepsilon_i^{(2)}\rangle + \cdots \qquad (۷-۳)$$

و

$$\varepsilon_i = \varepsilon_i{}^0 + \lambda\varepsilon_i^{(1)} + \lambda^2\varepsilon_i^{(2)} + \cdots \qquad (۷-۴)$$

نوشته شوند. کتهای $|\varepsilon_i^{(n)}\rangle$ و پارامترهای $\varepsilon_i^{(n)}$ بیانگر تصحیحات مرتبه n ام ویژه بردارها و ویژه‌مقدارها هستند. ما درنمایش دیراک کار خواهیم کرد اما شکل مکانیک موجی نیربه‌همین نتیجه منجر می‌شود. برای مقادیر به‌حد کافی کوچک λ می‌توان فرض کرد که تنها چندتوان اول برای نزدیک‌شدن به‌جواب دقیق لازم هستند. ما بحث خود را به‌تقریبهای مرتبه اول و مرتبه دوم محدود می‌کنیم.

با بردن (۷ـ۳) و (۷ـ۴) در (۷ـ۲) خواهیم داشت

$$\begin{aligned}(\mathscr{H}_0 + \lambda\hat{V})\{|\varepsilon_i{}^0\rangle + \lambda|\varepsilon_i^{(1)}\rangle + \lambda^2|\varepsilon_i^{(2)}\rangle + \cdots\}\\ = \{\varepsilon_i{}^0 + \lambda\varepsilon_i^{(1)} + \lambda^2\varepsilon_i^{(2)} + \cdots\}\{|\varepsilon_i{}^0\rangle + \lambda|\varepsilon_i^{(1)}\rangle + \lambda^2|\varepsilon_i^{(2)}\rangle + \cdots\}\end{aligned}$$

و با مجتمع‌کردن توانهای λ،

$$\begin{aligned}&[\mathscr{H}_0|\varepsilon_i^0\rangle - \varepsilon_i{}^0|\varepsilon_i{}^0\rangle] + [\mathscr{H}_0|\varepsilon_i^{(1)}\rangle + \hat{V}|\varepsilon_i{}^0\rangle - \varepsilon_i{}^0|\varepsilon_i^{(1)}\rangle - \varepsilon_i^{(1)}|\varepsilon_i{}^0\rangle]\lambda\\ &+ [\mathscr{H}_0|\varepsilon_i^{(2)}\rangle + \hat{V}|\varepsilon_i^{(1)}\rangle - \varepsilon_i^{(1)}|\varepsilon_i^{(1)}\rangle - \varepsilon_i{}^0|\varepsilon_i^{(2)}\rangle - \varepsilon_i^{(2)}|\varepsilon_i{}^0\rangle]\lambda^2 + \cdots\\ &= 0\end{aligned} \qquad (۷-۵)$$

چون این معادله باید برای تمام مقادیر λ معتبر باشد، ضریب هر λ^n باید برابر باصفرباشد؛ در نتیجه سلسله معادلات زیر را به‌دست خواهیم آورد

$$\mathscr{H}_0|\varepsilon_i{}^0\rangle = \varepsilon_i{}^0|\varepsilon_i{}^0\rangle \qquad (۷-۶)$$

$$\mathscr{H}_0|\varepsilon_i^{(1)}\rangle + \hat{V}|\varepsilon_i{}^0\rangle = \varepsilon_i{}^0|\varepsilon_i^{(1)}\rangle + \varepsilon_i^{(1)}|\varepsilon_i{}^0\rangle \qquad (۷-۷)$$

---

* البته، در اینجا فرض براین است که یک چنین سری توانی وجود داشته باشد.

$$\mathscr{H}_0|\varepsilon_i^{(2)}\rangle + \hat{V}|\varepsilon_i^{(1)}\rangle = \varepsilon_i^{(1)}|\varepsilon_i^{(1)}\rangle + \varepsilon_i{}^0|\varepsilon_i^{(2)}\rangle + \varepsilon_i^{(2)}|\varepsilon_i{}^0\rangle \qquad (۸-۷)$$
$$\vdots$$

معادله مرتبه صفرم درست همان معادله ویژه مقداری ناپریشیده (۷-۱) است ، ویژه کتها و ویژه مقدارهای آن دانسته فرض می‌شوند . معادله مرتبه n ام شامل تصحیحات بالاتر از مرتبه n ام نیست ، اما برای به‌دست‌آوردن این تصحیحات ،تمام جملات مرتبه‌های پائین‌تر باید قبلا" محاسبه شده باشند .

با بررسی نظریه مرتبه اول شروع می‌کنیم و بسط*

$$|\varepsilon_i^{(1)}\rangle = \sum_{j=1} a_{ij}^{(1)}|\varepsilon_j{}^0\rangle \qquad (i = 1, \ldots, \infty) \qquad (۹-۷)$$

را انجام می‌دهیم . این بسط مجاز است زیرا $|\varepsilon_j{}^0\rangle$ ها یک مجموعه کامل تشکیل می‌دهندکه هر کت دلخواهی را می‌توان برحسب آنها بسط داد . وقتی تمام $a_{ij}^{(1)}$ ها معلوم شدند ، تصحیح مرتبه اول ویژه کت i ام کامل می‌شود . با بردن (۷-۹) در (۷-۷) خواهیم داشت

$$\mathscr{H}_0 \sum_j a_{ij}^{(1)}|\varepsilon_j{}^0\rangle + \hat{V}|\varepsilon_i{}^0\rangle = \varepsilon_i{}^0 \sum_j a_{ij}^{(1)}|\varepsilon_j{}^0\rangle + \varepsilon_i^{(1)}|\varepsilon_i{}^0\rangle$$

یا

$$\sum_j (\varepsilon_j{}^0 - \varepsilon_i{}^0)a_{ij}^{(1)}|\varepsilon_j{}^0\rangle = (\varepsilon_i^{(1)} - \hat{V})|\varepsilon_i{}^0\rangle \qquad (۱۰-۷)$$

با ضرب‌کردن (۷-۱۰) در $\langle\varepsilon_k{}^0|$ و استفاده از شرط تعامد $\langle\varepsilon_k{}^0|\varepsilon_j{}^0\rangle = \delta_{kj}$ ، خواهیم‌داشت

$$\sum_{j=1}(\varepsilon_j{}^0 - \varepsilon_i{}^0)a_{ij}^{(1)}\delta_{kj} = \langle\varepsilon_k{}^0|(\varepsilon_i^{(1)} - \hat{V})|\varepsilon_i{}^0\rangle$$

یا

$$(\varepsilon_k{}^0 - \varepsilon_i{}^0)a_{ik}^{(1)} = \varepsilon_i^{(1)}\delta_{ki} - \langle\varepsilon_k{}^0|\hat{V}|\varepsilon_i{}^0\rangle \qquad (۱۱-۷)$$

برای به‌دست‌آوردن تصحیح مرتبه اول ویژه مقدار ، قرار می‌دهیم $k = i$ و نتیجه می‌گیریم

$$\varepsilon_i^{(1)} = \langle\varepsilon_i{}^0|\hat{V}|\varepsilon_i{}^0\rangle = V_{ii} = \langle V\rangle_i \qquad (۱۲-۷)$$

---

* جمع‌بندی روی حالتهای پیوسته j به‌انتگرال تبدیل می‌شود .

با استفاده از (۷ـ۴) ویژه مقدار انرژی (تا مرتبه اول) می‌شود

$$\varepsilon_i = \varepsilon_i^0 + \lambda V_{ii} \qquad (۱۳-۷)$$

برای پیداکردن ضرایب a_{ik} ،در (۷ـ۱۱) قرار می‌دهیم $i \neq k$ و نتیجه می‌گیریم

$$(\varepsilon_k^0 - \varepsilon_i^0)a_{ik}^{(1)} = -\langle \varepsilon_k^0 | \hat{V} | \varepsilon_i^0 \rangle \qquad (i \neq k)$$

یا

$$a_{ik}^{(1)} = \frac{V_{ki}}{\varepsilon_i^0 - \varepsilon_k^0} \qquad (۱۴-۷)$$

چون حالت i ام ناتبهگن فرض شده است ، داریم $\varepsilon_i^0 \neq \varepsilon_k^0$ بنابراین $a_{ik}^{(1)}$ متناهی است . از (۷ـ۹) و (۷ـ۳) ویژه کت پریشیده (تا مرتبه اول) می‌شود

$$\begin{aligned} |\varepsilon_i\rangle &= |\varepsilon_i^0\rangle + \lambda a_{ii}^{(1)}|\varepsilon_i^0\rangle + \lambda \sum_{j\neq i} \frac{V_{ji}}{\varepsilon_i^0 - \varepsilon_j^0} |\varepsilon_j^0\rangle \\ &= (1 + \lambda a_{ii}^{(1)})|\varepsilon_i^0\rangle + \lambda \sum_{j\neq i} \frac{V_{ji}}{\varepsilon_i^0 - \varepsilon_j^0} |\varepsilon_j^0\rangle \end{aligned} \qquad (۱۵-۷)$$

فقط کافی است که ضریب $a_{ii}^{(1)}$ تعیین شود . شرط خواهیم کرد که (۷ـ۱۵) تا مرتبه اول نسبت به λ بهنجارشده باشد . با قراردادن $\langle \varepsilon_i | \varepsilon_i \rangle = 1$ و حذف جملات از مرتبه λ^2 ،خواهیم داشت

$$|1 + \lambda a_{ii}^{(1)}|^2 \simeq 1 + 2\lambda \operatorname{Re} a_{ii}^{(1)} = 1 \qquad \text{یا} \qquad \operatorname{Re} a_{ii}^{(1)} = 0$$

بنابراین $a_{ii}^{(1)}$ در بدترین وضعیت خود موهومی است . می‌توان قرارداد $a_{ii}^{(1)} = 0$ بدون‌اینکه روی مقادیر قابل انتظار عملگرها تا مرتبه اول λ تأثیری داشته باشد .

پس از خلاصه‌کردن نتایج مرتبه اول ، خواهیم داشت

$$\varepsilon_i = \varepsilon_i^0 + \lambda V_{ii} \qquad (۱۶-۷)$$

و

$$|\varepsilon_i\rangle = |\varepsilon_i^0\rangle + \lambda \sum_{j\neq i} \frac{V_{ji}}{\varepsilon_i^0 - \varepsilon_j^0} |\varepsilon_j^0\rangle \qquad (۱۷-۷)$$

(که چنان‌که باید تا مرتبه اول λ بهنجارشده هستند) . مشابه مکانیک موجی آن خواهدبود

$$\varepsilon_i = \varepsilon_i^0 + \lambda V_{ii} \qquad (۱۸-۷)$$

$$\psi_i = \psi_i^0 + \lambda \sum_{j \neq i} \frac{V_{ji}}{\varepsilon_i^0 - \varepsilon_j^0} \psi_j^0 \qquad (۱۹-۷)$$

که در آن

$$V_{ji} = \int \psi_j^{0*} \mathcal{V}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla, \mathbf{r}\right) \psi_i^0 \, d\mathbf{r} \qquad (۲۰-۷)$$

دقت در (۷–۱۷) روشن می‌کند که چرا همگرائی سریع به‌شرط

$$\frac{|\lambda| \; |V_{ij}|}{|\varepsilon_j^0 - \varepsilon_i^0|} \ll 1$$

بستگی دارد .

۳ ــ یک کاربرد از نظریه مرتبه اول

نظریه پریشیدگی مرتبه اول را برای پیداکردن ویژه تابعها و ویژه مقدارهای هامیلتونی تعدیل شدهٔ نوسانگر یک بعدی (شکل ۷–۱) به‌کار خواهیم برد

$$\mathscr{H} = \mathscr{H}_0 + \lambda x^4 \qquad \left(\mathscr{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right)$$

این درست همان مسئله نوسانگر هماهنگ معمولی است که یک پریشیدگی ناهماهنگ کوچک به‌آن اضافه شده است .

با استفاده از

$$\psi_n^0(x) = \left[\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/2} \left(\frac{1}{2^n n!}\right)\right]^{1/2} e^{-\alpha x^2/2} H_n(\sqrt{\alpha} x) \qquad \left(\alpha = \frac{m\omega}{\hbar}\right)$$

و $\varepsilon_n^0 = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ به‌عنوان ویژه تابعها و ویژه مقدارهای ناپریشیده ، معادلات (۷–۱۸) و (۷–۱۹) کمیات پریشیده متناظر را به‌صورت

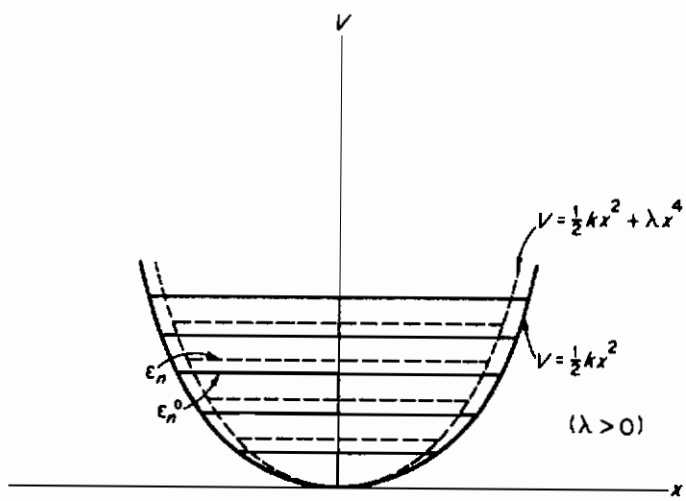
$$\psi_n = \psi_n^0 + \lambda \sum_{m \neq n} \left(\frac{V_{mn}}{\varepsilon_n^0 - \varepsilon_m^0} \right) \psi_m^0 \qquad (۲۱-۷)$$

و $\varepsilon_n = \varepsilon_n^0 + \lambda V_{nn}$ به‌دست می‌دهند . انرژی می‌تواند مستقیما" به‌صورت

$$\varepsilon_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega + \lambda \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/2} \frac{1}{2^n n!} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-\alpha x^2} H_n^2(\sqrt{\alpha}x) x^4$$

یا

$$\varepsilon_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega + \frac{3\lambda\hbar^2}{4m^2\omega^2}(2n^2 + 2n + 1) \qquad (۲۲-۷)$$



شکل (۷-۱) جابه‌جاییهای انرژی برای پتانسیل نوسانگرپریشیده . منحنیهای پر بیانگر کمیات ناپریشیده هستند .

محاسبه شود . عناصر ماتریس موجود در (۷-۲۱) را محاسبه نخواهیم کرد لیکن خاطرنشان می‌کنیم که چنانچه داشته باشیم $|m - n| > 4$ ، این عناصر صفر می‌شوند . این نتیجه‌از این واقعیت ناشی می‌شود که $x^4 H_n$ می‌تواند به‌صورت یک ترکیب خطی از چندجمله‌ایهای هرمیت واقع در گسترهٔ از H_{n-4} تا H_{n+4} بیان شو د . با استفاده‌از

$$x^4 \psi_n^0 = \sum_{l=n-4}^{n+4} a_l \psi_l^0$$

و شرط تعامد ψ_n^0 ، برای $|m-n| > 4$ خواهیم داشت

$$V_{mn} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^{0*}(x^4\psi_n^0)\, dx = 0$$

بنابراین لازم‌است که برای تصحیحات مرتبه اول حالت ψ_n ، حداکثر هشت عنصر ماتریس موجود در (۷ــ۲۱) را محاسبه کنیم .

از نظر تجربی ، مشاهدهٔ ترازهای انرژی یک سیستم فیزیکی آسان‌تراز مشاهدهٔ سایر مشخصات آن‌است . اگر پریشیدگی کوچک باشد ، ویژه *تابعهای* مرتبه صفر انرژی معمولا" برای مقایسه باآزمایش مناسب‌اند .ازطرف دیگر ، ویژه‌مقدارهای مرتبه اول‌انرژی معمولا" می‌توانند مستقیما" مشاهده شوند . همان‌طور که در زیر نشان خواهیم داد ، ویژه تابعهایی که تا مرتبه (p ــ۱) تصحیح شده‌اند ، برای محاسبه مرتبهٔ p ام ویژه مقدارها مناسب‌اند . بنابر این ، وقتی که از نظریه مرتبه اول صحبت می‌کنیم منظور ما انرژیها است و نه ویژه تابعها ، چرا که در این صورت ویژه تابعها به‌وسیله‌مولفه‌های مرتبه صفر (ناپریشیده) خود بیان می‌شوند .

۴ ــ نظریه مرتبه دوم

چند دلیل برای‌ادامه تا تصحیحات مرتبه دوم ، حتی برای λ های کوچک ،وجوددارد . اولا" ، این تصحیحات می‌توانند از طریق تجربی (به‌عنوان مثال از طریق طیف نمائی)قابل مشاهده باشند ، و بنابراین برای تائید یک نظریه بخصوص مفید هستند . ولی مهمتراز همه ، اگرتصحیحات مرتبه‌اول صفر باشند این تصحیحات می‌توانند به‌عنوان تصحیحات مرتبه‌اول تلقی شوند . به‌عنوان مثال ، فرض کنیم پریشیدگی مسئله نوسانگر بالا (به‌جای λx^4) ، λx^3 باشد . در این صورت تصحیحات مرتبه اول ویژه مقدارها خواهند بود

$$V_{nn} = \int dx\, \psi_n^{0*}\, x^3\psi_n^0 = 0$$

که صفربودن آن از فردبودن تابع زیر انتگرال ناشی می‌شود . در اینجاست که تصحیحات مرتبه دوم اهمیت پیدا می‌کنند .

جملات مرتبه دوم با حل (۷ــ۸) با استفاده از نتایج مرتبه اول به‌دست آمده ایجاد می‌شوند . طرز عمل سر راست است و کاملا" مشابه روشی است که در نظریه مرتبه اول به کار رفته است . نتایج به‌قرار زیراند

$$\varepsilon_i = \varepsilon_i^0 + \lambda V_{ii} + \lambda^2 \sum_{j\neq i} \frac{V_{ji}V_{ij}}{\varepsilon_i^0 - \varepsilon_j^0} \qquad (۲۳-۷)$$

و

$$|\varepsilon_i\rangle = \left[1 - \frac{1}{2}\lambda^2 \sum_{j\neq i} \frac{V_{ji}V_{ij}}{(\varepsilon_i^0 - \varepsilon_j^0)^2}|\varepsilon_i^0\rangle\right] + \lambda\left[\sum_{j\neq i} \frac{V_{ji}}{\varepsilon_i^0 - \varepsilon_j^0}\,|\varepsilon_j^0\rangle\right]$$
$$+ \lambda^2\left[\sum_{j\neq i} \frac{1}{\varepsilon_i^0 - \varepsilon_j^0}\left\{\sum_{k\neq i} \frac{V_{ki}V_{jk}}{\varepsilon_i^0 - \varepsilon_k^0} - \frac{V_{ii}V_{ji}}{\varepsilon_i^0 - \varepsilon_j^0}\right\}|\varepsilon_j^0\rangle\right] \qquad (۲۴-۷)$$

(که تا درجه دوم λ بهنجار شده‌اند) .

مطالعه $\varepsilon_i^{(1)}$ و $\varepsilon_i^{(2)}$ در (۷–۲۳) نشان می‌دهد که

$$\varepsilon_i^{(1)} = V_{ii} = \langle\varepsilon_i^0|\,\hat{V}|\varepsilon_i^0\rangle$$

و

$$\varepsilon_i^{(2)} = \sum_{j\neq i} \frac{V_{ji}V_{ij}}{\varepsilon_i^0 - \varepsilon_j^0} = \langle\varepsilon_i^0|\,\hat{V}|\varepsilon_i^{(1)}\rangle$$

برای تعمیم ، می‌بینم که تصحیح مرتبه (p –۱) ام ویژه بردار مستقیما" ما را به‌تصحیح‌مرتبه p ام ویژه مقدار می‌رساند ، یعنی

$$\varepsilon_i^{(p)} = \langle\varepsilon_i^0|\,\hat{V}|\varepsilon_i^{(p-1)}\rangle \qquad (۲۵-۷)$$

این قاعده کفایت ویژه تابع مرتبه (p –۱) ام در محاسبات انرژی مرتبه p ام را مورد تاکید قرار می‌دهد .

نظریه مرتبه دوم می‌تواند برای محاسبه تقریبی ترازهای انرژی یک نوسانگر با یک پریشیدگی ناهنماهنگ ، λx^3 ، به‌کار رود . با قراردادن

$$\mathscr{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2, \qquad \varepsilon_n^0 = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

و

$$\psi_n^0 = \left[\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/2}\left(\frac{1}{2^n n!}\right)\right]^{1/2} e^{-\frac{1}{2}\alpha x^2} H_n(\sqrt{\alpha}x)$$

(۷ ــ ۲۳) خواهد شد

$$\varepsilon_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega + \lambda^2 \sum_{m \neq n} \frac{|V_{mn}|^2}{\hbar\omega(n-m)}$$

که در آن

$$V_{mn} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^{*0} x^3 \psi_n^{\,0}\, dx.$$

محاسبه انتگرالها به‌عنوان یک تمرین واگذار می‌شود (مسئله ۷ــ۳) .

۵ ــ پریشیدگی یک تراز تبهگن

مشاهده می‌کنیم که اگر تراز i ام تبهگن باشد (مثلا" ، $\varepsilon_i^{\,0} = \varepsilon_k^{\,0}$) ،دراین‌صورت‌هریک از جمله‌های (۷ــ۲۴) که شامل $V_{ki}/(\varepsilon_i^{\,0} - \varepsilon_k^{\,0})$ باشد واگرا می‌شود . البته اگر V_{ki} نیز صفر می‌بود این‌اشکال می‌توانست برطرف گردد . اما ، این طرز برخورد صرفا" نمایانگر،به‌اصطلاح یک مداوا است نه معالجه .

مشکلاتی که با تراز تبهگن همراه‌اند از عدم یکتایی ویژه حالتها ناشی می‌شوند . فرض کنیم $\mathscr{H}_0$ تبهگن باشد ولی هامیلتونی پریشیده $\mathscr{H} = \mathscr{H}_0 + \lambda\mathscr{V}$ ناتبهگن باشد ، یعنی، پریشیدگی تبهگنی‌را از بین می‌برد . به‌عنوان مثال ، $\mathscr{H}_0$ ممکن است یک هامیلتونی وابسته به‌نیروی مرکزی با تبهگنی‌فضائی (جهتی) باشد ، و $\lambda\mathscr{V}$ یک میدان مغناطیسی یکنواخت باشد که این تبهگنی را از بین می‌برد . در این صورت ویژه حالتهای ناپریشیده یکتا نیستند و هر مجموعه از آنها متفاوت از هرمجموعه دیگر است .اما ، ویژه حالتهای $\mathscr{H}$ ، یعنی $|\varepsilon_i\rangle$ ، باید یکتا باشند و تنها با تقریب می‌توانند (برای مقادیر کوچک λ) برابر با یک مجموعه ناپریشیده خاص $|\widetilde{\varepsilon_i^{\,0}}\rangle$ باشند . این مجموعه را مجموعه ناپریشیده "انتخابی" می‌نامیم . بدیهی‌است که اگر بخواهیم یک محاسبه مرتبه اول انجام دهیم ، باید این مجموعه‌انتخابی را به‌عنوان یک تقریب مرتبه صفر به‌کار بریم . به‌طور معادل ، باید یک تناظر یک به یک‌بین حالتهای پریشیده و مجموعه ناپریشیده "انتخابی" برقرار کنیم به‌طوری که

$$|\varepsilon_i\rangle \xrightarrow[\lambda \to 0]{} |\widetilde{\varepsilon_i^{\,0}}\rangle \qquad (۷ ــ ۲۶)$$

بنابراین وظیفه نخست ما عبارت است از پیداکردن ویژه حالتهای درست مرتبه صفر

برای انجام تناظر فوق . وقتی این حالتها پیدا شدند ، همان‌طور که خواهیم دید ، هیچ جمله واگرائی در (۷ـ۲۴) ظاهر نخواهد شد . به‌علاوه ، جابه‌جاییهای مرتبه اول انرژی ، به‌سادگی ، به‌وسیله دو جمله اول (۷ـ۲۳) داده خواهند شد که عبارتنداز

$$\varepsilon_i = \varepsilon_i{}^0 + \lambda\langle\widetilde{\varepsilon_i{}^0}|\mathcal{V}|\widetilde{\varepsilon_i{}^0}\rangle \qquad (۷-۲۷)$$

پریشیدگی یک تراز s بار تبهگن را در نظر بگیریم و قرار دهیم

$$\varepsilon_i{}^0 = \varepsilon^0 \qquad (i = 1, \ldots, s)$$

کتهای $|\varepsilon_i{}^0\rangle$ ، $i = 1, \ldots, s$ ، ویژه‌حالتهای یکتای انرژی نبوده و لزوما" متعامد نیستند، گرچه فرض می‌کنیم که آنها را متعامد ساخته‌ایم* .

مجموعه انتخابی که دنبال آن هستیم همیشه می‌تواند به‌کمک

$$|\widetilde{\varepsilon_i{}^0}\rangle = \sum_{j=1}^{s} b_{ij}|\varepsilon_j{}^0\rangle \qquad (i = 1, \ldots, s) \qquad (۷-۲۸)$$

ساخته شود . چون مجموعه انتخابی (و هم‌چنین مجموعه اولیه) باید راست‌هنجار باشند ، خواهیم داشت

$$\begin{aligned} \langle\widetilde{\varepsilon_i{}^0}|\widetilde{\varepsilon_i{}^0}\rangle &= 1 \\ \sum_{j,k=1}^{s} b_{ij}^* b_{ik}\langle\varepsilon_j{}^0|\varepsilon_k{}^0\rangle &= \sum_{j,k=1}^{s} b_{ij}^* b_{ik}\delta_{jk} \\ &= \sum_{j=1}^{s} |b_{ij}|^2 = 1 \end{aligned} \qquad (۷-۲۹)$$

ضرایب b_{ij} مجموعه انتخابی "جدید" را تعیین می‌کنند . با به‌کاربردن $|\widetilde{\varepsilon_i{}^0}\rangle$ در معادله مرتبه اول (۷ـ۷) ، خواهیم داشت

$$\mathscr{H}_0|\varepsilon_i^{(1)}\rangle + \mathcal{V}|\widetilde{\varepsilon_i{}^0}\rangle = \varepsilon_i{}^0|\varepsilon_i^{(1)}\rangle + \varepsilon_i^{(1)}|\widetilde{\varepsilon_i{}^0}\rangle \qquad (۷-۳۰)$$

$|\varepsilon_i^{(1)}\rangle$ را در پایه "قدیمی" به‌صورت

---

* یادآوری کنیم که همیشه می‌توان یک چنین مجموعه راست‌هنجاری ساخت .

$$|\varepsilon_i^{(1)}\rangle = \sum_{j=1} a_{ij}^{(1)} |\varepsilon_j{}^0\rangle \qquad (۳۱-۷)$$

بسط می‌دهیم . با بردن (۷–۳۱) و (۷–۲۸) در (۷–۳۰) ، نتیجه می‌گیریم

$$\sum_{j=1}^{\infty} a_{ij}^{(1)} \varepsilon_j{}^0 |\varepsilon_j{}^0\rangle + \sum_{j=1}^{s} \hat{V} b_{ij} |\varepsilon_j{}^0\rangle = \varepsilon_i{}^0 \sum_{j=1}^{\infty} a_{ij}^{(1)} |\varepsilon_j{}^0\rangle + \varepsilon_i^{(1)} \sum_{j=1}^{s} b_{ij} |\varepsilon_j{}^0\rangle \qquad (۳۲-۷)$$

چون برای $i \leqslant s$ داریم $\varepsilon_j{}^0 = \varepsilon_i{}^0 = \varepsilon^0$ ، s جمله اول سریهای بینهایت در دو طرف صفر می‌شوند به‌طوری که (۷–۳۲) خواهد شد

$$\sum_{j>s}^{\infty} a_{ij}^{(1)} \varepsilon_j{}^0 |\varepsilon_j{}^0\rangle + \sum_{j=1}^{s} \hat{V} b_{ij} |\varepsilon_j{}^0\rangle = \varepsilon^0 \sum_{j>s}^{\infty} a_{ij}^{(1)} |\varepsilon_j{}^0\rangle + \varepsilon_i^{(1)} \sum_{j=1}^{s} b_{ij} |\varepsilon_j{}^0\rangle \qquad (۳۳-۷)$$

سپس، آنرا در $\langle\varepsilon_k{}^0|$ ، که در آن $k = 1, \ldots, s$ است ، ضرب می‌کنیم و با استفاده‌از راست هنجاری نتیجه می‌گیریم

$$\sum_{j=1}^{s} b_{ij} \langle\varepsilon_k{}^0| \hat{V} |\varepsilon_j{}^0\rangle = \varepsilon_i^{(1)} b_{ik}$$

یا

$$\sum_{j=1}^{s} V_{kj} b_{ij} = \varepsilon_i^{(1)} b_{ik} \qquad (۳۴-۷)$$

این مجموعه معادلات همگن برای ضرایب b_{ij} فقط برای بعضی از مقادیر $\varepsilon_i^{(1)}$ دارای جواب غیربدیهی‌است .درواقع ، (۷–۳۴)می‌تواند به‌صورت یک مسئله ویژه مقداری به‌شکل‌ماتریسی

$$\mathbf{V}\mathbf{b}_i = \varepsilon_i^{(1)} \mathbf{b}_i$$

یا

$$\begin{pmatrix} V_{11} & \cdots & V_{1s} \\ & \ddots & \\ V_{s1} & \cdots & V_{ss} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{i1} \\ \vdots \\ b_{is} \end{pmatrix} = \varepsilon_i^{(1)} \begin{pmatrix} b_{i1} \\ \vdots \\ b_{is} \end{pmatrix} \qquad (i = 1, \ldots, s) \qquad (۳۵-۷)$$

نوشته شود که در آن شرط بهنجارش (۷–۲۹) خواهد بود

$$\sum_{j=1}^{s} |b_{ij}|^2 = 1$$

بدین‌ترتیب به‌قاعده زیر می‌رسیم :

ضرایبی که ویژه کت انتخابی i ام $|\widetilde{\varepsilon_i^0}\rangle$ را تعیین‌می‌کنند به‌وسیله‌مولفه‌های ویژه‌بردار (بهنجارشده) i ام $\mathbf{b}_i$ ازماتریس پریشیدگی $\mathbf{V}$ داده‌می‌شوند. به‌علاوه، جابه‌جایی مرتبه اول در انرژی حالت عبارت است از ویژه مقدار متناظر $\varepsilon_i^{(1)}$ از ماتریس $\mathbf{V}$.

قاعده فوق طرز عمل زیر را برای ساختن ویژه‌کتهای انتخابی یک تراز s مرتبه تبهگن داده شده پیشنهاد می‌کند :

(الف) برای هر تراز تبهگن از ویژه‌کتهای داده شده $|\varepsilon_i^0\rangle$ برای ساختن ماتریس $s \times s$ استفاده کنید ، یعنی

$$\mathbf{V} = \begin{pmatrix} \langle \varepsilon_1^0 | \hat{V} | \varepsilon_1^0 \rangle & \cdots & \langle \varepsilon_1^0 | \hat{V} | \varepsilon_s^0 \rangle \\ \langle \varepsilon_s^0 | \hat{V} | \varepsilon_1^0 \rangle & \cdots & \langle \varepsilon_s^0 | \hat{V} | \varepsilon_s^0 \rangle \end{pmatrix} \qquad (۳۶-۷)$$

(ب) s ویژه مقدار $\varepsilon_i^{(1)}$ و ویژه بردارهای بهنجارشده متناظر (ماتریس‌های ستونی)

$$\mathbf{b}_i = \begin{pmatrix} b_{i1} \\ \vdots \\ b_{ij} \\ \vdots \\ b_{is} \end{pmatrix} \qquad (i = 1, \ldots, s) \qquad (۳۷-۷)$$

را پیدا کنید . از مولفه‌ها برای ساختن مجموعه انتخابی جدید به‌صورت

$$|\widetilde{\varepsilon_i^0}\rangle = \sum_{j=1}^{s} b_{ij} |\varepsilon_j^0\rangle \qquad (۳۸-۷)$$

استفاده کنید .

(ج) ویژه مقدارهای متناظر $\mathbf{V}$ ، یعنی $\varepsilon_i^{(1)}$ ، تصحیحات مرتبه اول انرژی $|\varepsilon_i\rangle$ را به‌دست می‌دهند ، یعنی ،

$$\varepsilon_i = \varepsilon^0 + \lambda \varepsilon_i^{(1)} \qquad (i = 1, \ldots, s) \qquad (۳۹-۷)$$

عموما" ، این ویژه مقدار ها متمایزاند $(\varepsilon_i^{(1)} \neq \varepsilon_k^{(1)}, i \neq k)$ به‌طوری‌که تبهگنی معمولا" درمرتبه اول از بین می‌رود .

اگر ازآغازمجموعه انتخابی را ، به‌جای مجموعه داده شده ، به‌عنوان تقریب مرتبه‌صفر به‌کار برده بودیم ، می‌توانستیم با نظریه ناتبهگن مرتبه اول ، که در بخش پیشین‌شرح داده شد ، کار را ادامه دهیم . در این مورد ، عناصر ماتریس در شرایط

$$V_{ij} = \langle \widetilde{\varepsilon_i^0} | \hat{V} | \widetilde{\varepsilon_j^0} \rangle = V_{ii}\delta_{ij} \qquad (۴۰-۷)$$

صدق می‌کردند و جملات واگرای $(j \neq i)$ در (۷–۲۴) وجود نمی‌داشتند. به‌علاوه، چون $\varepsilon_i^{(1)}$ معرف ویژه مقدارهای $\hat{V}$ هستند، باید برابر با عناصر قطری آن باشند، یعنی،

$$\varepsilon_i^{(1)} = \langle \widetilde{\varepsilon_i^0} | V | \widetilde{\varepsilon_i^0} \rangle$$

بنابراین داریم

$$\varepsilon_i = \varepsilon_i^0 + \lambda \langle \widetilde{\varepsilon_i^0} | \hat{V} | \widetilde{\varepsilon_i^0} \rangle$$

که درست همان نتیجه نظریه پریشیدگی ناتبهگن است.

۶ ــ کاربرد نظریه پریشیدگی در یک تراز تبهگن ــ اثر استارک در هیدرژن*

اثریک میدان الکتریکی‌یکنواخت $\mathbf{E}$ روی ترازهای هیدرژن اثر استارک خوانده‌می‌شود. اگر این میدان به‌اندازه کافی قوی باشد، می‌توان از برهم‌کنش اسپین ــ مدار، همان‌طور که دراثر پاشن ــ باک‌کردیم، کاملا" صرف‌نظر کرد. وقتی یک الکترون وارد یک‌میدان الکتریکی یکنواخت شود، انرژی پتانسیلی برابر با $\int e\mathbf{E}\cdot d\mathbf{r} = e\mathbf{E}\cdot\mathbf{r}$ به‌دست می‌آورد. در هیدرژن، این عبارت می‌تواند به‌صورت $-\mathbf{p}\cdot\mathbf{E}$، که در آن $\mathbf{p} = -e\mathbf{r}$ گشتاور دوقطبی سیستم پروتون الکترون است، نیز نوشته شود. هامیلتونی مربوطه عبارت است از

$$\mathscr{H}_{\text{Stark}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} + e\mathbf{E}\cdot\mathbf{r} \qquad (۴۱-۷)$$

---

* اثر استارک در واقع مثال مناسبی برای مساله پریشیدگی حالت‌مقید نیست. پتانسیل‌در راستای میدان به‌صورت $V = -eEz$ تغییرمی‌کند. وقتی $r \to \infty$، پتانسیل به‌حدکافی‌منفی می‌شود به‌طوری‌که قادر به‌حفظ حالتهای مقید نیست. بنابراین احتمال یافتن ذره‌دربینهایت صفر نیست و میدان توانائی "یونش" سیستم را که در آغاز مقیدبوده است دارد. حالتها شبه‌گسسته‌اند و بعضی از خواص‌وابسته به‌یک طیف پیوسته‌را دارند. با وجود این، مادامی که میدان الکتریکی‌کوچک باشد احتمال یونش‌کوچک‌است و مساله را می‌توان با استفاده از روشهای پریشیدگی حالت مقید حل کرد.

با انتخاب جهت E در امتداد محور z ، پریشیدگی به‌شکل λV ، که در آن $\lambda = +eE$ و $V = z = r\cos\theta$ است ، در می‌آید . در نمایش $|nlm_l\rangle$ * ، حالت پایه $|100\rangle$ ناتبهگن است. تصحیح در انرژی برای این تراز ، از (۷ــ۱۶) ، عبارت است از

$$\lambda\varepsilon^{(1)} = +eE\langle 100|z|100\rangle$$

عنصر ماتریس عبارت است از

$$\langle 100|z|100\rangle = \int \psi^*_{100}\, z\psi_{100}\, d\mathbf{r}$$

اما ، چون $|\psi_{100}|^2$ تابع زوج و z تابع فردی است ، تابع زیر انتگرال تابع فردی است .بنابر این ، انتگرال صفر می‌شود و جابه‌جایی مرتبه اول استارک در حالت پایه هیدرژن وجود ندارد .

اولین حالت برانگیخته چهاربار تبهگن است ، یعنی تمام حالات $|200\rangle$ ، $|210\rangle$ و $|21\pm1\rangle$ دارای انرژی $\varepsilon_2 = \varepsilon_1/2^2$ هستند . در اصل ، باید یک ماتریس ۴×۴ برای V بسازیم . خوشبختانه این مسئله می‌تواند به‌مسئله‌ای که شامل یک ماتریس ۲×۲ است تبدیل شود . برای انجام این کار نخست مشاهده می‌کنیم که عناصر غیرقطری ماتریس ۴×۴ وابسته به‌حالتهای $|21+1\rangle$ و $|21-1\rangle$ صفراند . چون پریشیدگی مستقل از زاویه سمتی ϕ است عناصر ماتریس مورد نظر شامل حاصلضربهای داخلی قسمتهای وابسته به ϕ ی حالتهای نیروی مرکزی است . اما چون این قسمتها متعامداند نتیجه می‌گیریم

$$\langle 211|z|21-1\rangle = \langle 211|z|210\rangle = \langle 211|z|200\rangle = 0$$
$$\langle 21-1|z|211\rangle = \langle 21-1|z|210\rangle = \langle 21-1|z|200\rangle = 0$$

بنابراین حالتهای $|21\pm1\rangle$ اکنون جزئی از مجموعه انتخابی هستند . جابه‌جائیهای انرژی آنها به‌وسیله $\langle 21\pm1|z|21\pm1\rangle$ داده می‌شوند . لیکن نتیجه می‌شود که انتگرالهای وابسته به‌این عناصر نیز صفر می‌شوند . این نکته می‌تواند به‌وسیله کاربرد استدلالات پاریته در مورد توابع زیر انتگرال اثبات شود . در نتیجه جابه‌جایی مرتبه اول استارک وابسته به‌حالتهای $|21\pm1\rangle$ وجود ندارد .

حالتهای انتخابی باقی مانده باید از $|210\rangle$ و $|200\rangle$ ساخته شوند .عناصرماتریسی

---

* نمادهای اسپین را حذف می‌کنیم .

برای این حالتها انتگرالهایی را وارد می‌کنند که با استفاده از توابع هیدرژنی در (۵–۷۴) به‌صورت

$$\langle 210|z|210\rangle = \langle 200|z|200\rangle = 0$$

و

$$\langle 210|z|200\rangle = \int \psi_{210}^{*}\, r\cos\theta\psi_{200}\, d\mathbf{r} = \frac{-3\hbar^2}{me^2} = -3a$$

محاسبه می‌شوند . ماتریس تقلیل یافته خواهد شد

$$\mathbf{V} = \begin{pmatrix} \langle 200|r\cos\theta|200\rangle & \langle 200|r\cos\theta|210\rangle \\ \langle 200|r\cos\theta|210\rangle & \langle 210|r\cos\theta|210\rangle \end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix} 0 & -3a \\ -3a & 0 \end{pmatrix} \qquad (a = \hbar^2/me^2)$$

ویژه مقدارهای رابطه ماتریسی

$$\begin{pmatrix} 0 & -3a \\ -3a & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} b_{i1} \\ b_{i2} \end{pmatrix} = \varepsilon_i^{(1)}\begin{pmatrix} b_{i1} \\ b_{i2} \end{pmatrix} \qquad (i = 1, 2) \qquad (۴۲-۷)$$

به‌وسیله جوابهای معادله (مفسر)

$$\begin{vmatrix} 0-\varepsilon_i^{(1)} & -3a \\ -3a & 0-\varepsilon_i^{(1)} \end{vmatrix} = 0$$

یا

$$\varepsilon_i^{(1)} = \pm 3a \qquad (۴۳-۷)$$

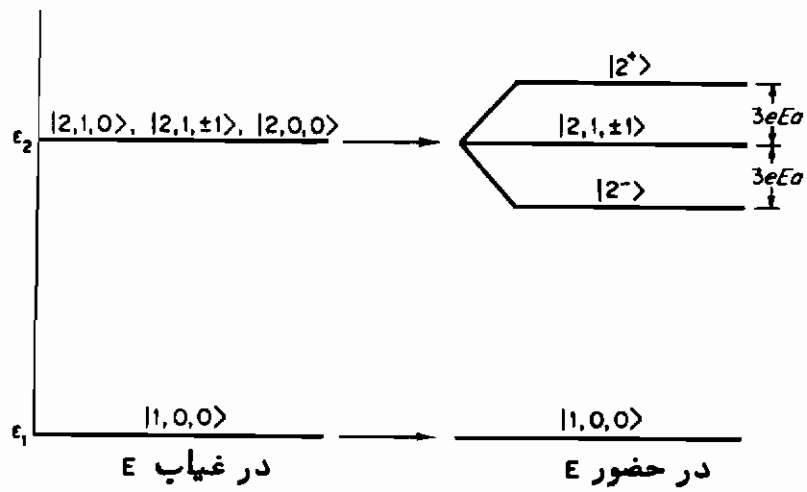
تعیین می‌شوند . با قراردادن $\varepsilon_+^{(1)} = 3a$ و $\varepsilon_-^{(1)} = -3a$ ، ویژه بردارهای بهنجار شده متناظر خواهند شد

$$\mathbf{b}_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \qquad \text{و} \qquad \mathbf{b}_- = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ +1 \end{pmatrix} \qquad (۴۴-۷)$$

بنابراین حالتهای صحیح (انتخابی) مرتبهٔ صفر برای تراز $n = 2$ و جابه‌جاییهای انرژی آنها

عبارتند از (شکل ۷ــ۲)

$$|21\pm1\rangle \qquad \text{(بدون جابه‌جایی)}$$
$$|2^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|200\rangle - |210\rangle)\,[\text{جابه‌جایی} = \lambda\varepsilon_+^{(1)} = +eE(3a)]$$
$$|2^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|200\rangle + |210\rangle)\,[\text{جابه‌جایی} = \lambda\varepsilon_-^{(1)} = +eE(-3a)] \qquad (۴۵-۷)$$



شکل (۷ــ۲) جابه‌جایی مرتبه اول استارک در هیدرژن

به‌طور خلاصه ، اگر یک تراز ناپریشیده تبهگن باشد ، ابتدا باید یک "ویژه پایه انتخابی" مناسب $|\widetilde{\varepsilon_i^0}\rangle$ پیدا کرد که ماتریس پریشیدگی نسبت به‌آن قطری باشد . این کتها با کتهای پریشیده دارای یک تناظر یک به‌یک‌هستند و به‌عنوان یک تقریب مرتبه صفر مناسب به‌کار می‌روند .دراغلب موارد ، لازم است که مجموعه انتخابی را با حل معادله ماتریسی (۷ــ۳۵) پیدا کنیم .

اما ،دربعضی موارد بینش فیزیکی وتقارن مارا در پیداکردن این مجموعه‌یاری‌می‌کند . این نکته را در مورد برهم‌کنش اسپین ــ مدار در هیدرژن نشان خواهیم داد .

۷ ــ اتم هیدرژن با برهم‌کنش اسپین ــ مدار

دیدیم که حتی در یک وضعیت منزوی ،پتانسیلی‌که یک‌الکترون‌اتمی‌می‌بیند پتانسیل نیروی مرکزی خالص نیست .انحراف کوچک ناشی از آثار مغناطیسی ، برهم‌کنش اسپین ــ مدار خوانده می‌شود . هامیلتونی مربوطه ، از (۶ــ۳۴) ، عبارت است از

$$\mathscr{H}_{s-o} = \mathscr{H}_0 + \frac{e^2 f(r)}{2m^2c^2}\hat{\mathbf{L}}\cdot\hat{\mathbf{S}} \qquad (۴۶-۷)$$

که در آن

$$\mathscr{H}_0 = \mathscr{H}_{cf} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r) \qquad \text{و} \qquad f(r) = \frac{1}{e^2 r}\frac{dV}{dr}$$

این مسئله را با استفاده از روشهای پریشیدگی مذکور در فوق بررسی خواهیم کرد . ویژه حالتهای ناپریشیده نیروی مرکزی نسبت به m_l و m_s تبهگن‌اند و دارای انرژی ε_{nl} می‌باشند. دومجموعه مخصوصا" جالب ناپریشیده که قبلا" مشخص گردید عبارتنداز $|nlm_l m_s\rangle$ و $|nljm_j\rangle$. مناسب است که پریشیدگی اسپین ــ مدار را به‌صورت

$$\lambda = \frac{e^2}{2m^2c^2}, \qquad \hat{V} = f(r)\hat{\mathbf{L}}\cdot\hat{\mathbf{S}}$$

تجزیه کنیم .

یک مجموعه‌از ویژه‌بردارهای ناپریشیده می‌تواند به‌عنوان تقریب مرتبه صفر در مسئله پریشیدگی به‌کار رود به‌شرط اینکه این مجموعه ماتریس $\mathbf{V}$ را قطری کند . از این نظر مجموعه $|nlm_l m_s\rangle$ در برهم‌کنش اسپین ــ مدار با شکست مواجه می‌شود زیرا

$$\langle nlm_l m_s|f(r)\hat{\mathbf{L}}\cdot\hat{\mathbf{S}}|nlm_{l'}m_{s'}\rangle \neq C\delta_{m_l m_{l'}}\delta_{m_s m_{s'}}$$

می‌توانستیم از مجموعه $|nlm_l m_s\rangle$ برای ساختن مجموعه مناسبی که ماتریس $\mathbf{V}$ در آن قطری باشد استفاده کنیم . ولی این مجموعه را با استفاده از بعضی از بینش‌های فیزیکی پیدا خواهیم کرد .

هامیلتونی (۷ــ۴۶) ، $\mathscr{H}_{s-o}$ ، با $\hat{L}_z$ و $\hat{S}_z$ جابه‌جاپذیر نیست . این عدم سازگاری از این واقعیت ناشی می‌شود که $\hat{\mathbf{L}}\cdot\hat{\mathbf{S}}$ شامل $\hat{L}_x$ ، $\hat{L}_y$ ، $\hat{S}_x$ و $\hat{S}_y$ است . بنابراین تعجب‌آور نخواهد بود که ویژه حالتهای $\hat{L}_z$ و $\hat{S}_z$ ، یعنی ، $|nlm_l m_s\rangle$ ، ویژه‌حالتهای $\mathscr{H}_{s-o}$ نباشند . از طرف دیگر ، $\mathscr{H}_{s-o}$ با $\hat{J}^2$ و $\hat{J}_z$ سازگاراست . به‌عنوان مثال ، بااستفاده‌ازاتحاد

$$\hat{J}^2 = \hat{L}^2 + 2\hat{\mathbf{L}}\cdot\hat{\mathbf{S}} + \hat{S}^2$$

یا

$$\hat{\mathbf{L}}\cdot\hat{\mathbf{S}} = \tfrac{1}{2}(\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2) \qquad (۴۷-۷)$$

نتیجه می‌گیریم

$$[\hat{\mathbf{L}}\cdot\hat{\mathbf{S}}, \hat{J}^2] = \tfrac{1}{2}\{[\hat{J}^2, \hat{J}^2] - [\hat{L}^2, \hat{J}^2] - [\hat{S}^2, \hat{J}^2]\} = 0$$

یک محاسبه مشابه نشان می‌دهد که

$$[\hat{\mathbf{L}}\cdot\hat{\mathbf{S}}, \hat{J}_z] = 0$$

چون $\mathscr{H}_{s-o}$ ، $\hat{J}^2$ و $\hat{J}_z$ دوبه‌دو جابه‌جاپذیراند این عملگرها حداقل یک ویژه پایه مشترک دارند . بخصوص، در حالی که ویژه حالتهای نیروی مرکزی $|nljm_j\rangle$ ممکن است دقیق نباشند ، محتمل است که این حالتها یک مجموعه انتخابی تشکیل‌دهند و بتوانند به‌عنوان تقریب مرتبه صفر ویژه پایه دقیق $\mathscr{H}_{s-o}$ به‌کار روند .

اگراین استدلال فیزیکی متقاعدکننده نباشد ، ما صرفا" نیاز به‌تحقیق این نکته داریم که آیا ماتریس $\mathbf{V}$ در پایه $|nljm_j\rangle$ قطری است یا نه . با نوشتن

$$V^{nl}_{jj'm_jm_j'} = \langle nlj'm_j'|f(r)\hat{\mathbf{L}}\cdot\hat{\mathbf{S}}|nljm_j\rangle$$

و استفاده از (۷ـ۴۷) ، نتیجه می‌گیریم

$$\begin{aligned} V^{nl}_{jj'm_jm_j'} &= \langle nlj'm_j'|f(r)\tfrac{1}{2}(\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2)|nljm_j\rangle \\ &= \tfrac{1}{2}[j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)]\hbar^2\langle nlj'm_j'|f(r)|nljm_j\rangle \\ &= \tfrac{1}{2}[j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)]\hbar^2\langle nl|f(r)|nl\rangle\,\delta_{jj'm_jm_j'} \qquad (s=\tfrac{1}{2}) \end{aligned} \tag{۴۸ ـ ۷}$$

یعنی ، $\mathbf{V}$ قطری است .

اکنون روشن است که مجموعه $|nljm_j\rangle$ بیانگر تقریب مرتبه‌صفر درست ویژه‌حالتهای دقیق هامیلتونی اسپین ـ مدار است . با قراردادن $j=j'$ و $m_j=m_j'$ در (۷ـ۴۸) ، انرژی تصحیح‌شده تا مرتبه اول خواهد شد

$$\begin{aligned} \varepsilon_{nlj} &= \varepsilon_{nl} + \lambda V^{nl}_{jjm_jm_j} \\ &= \varepsilon_{nl} + \frac{e^2}{2m^2c^2}\left[\frac{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)}{2}\right]\hbar^2\langle n, l|f(r)|n, l\rangle \end{aligned} \tag{۴۹ ـ ۷}$$

شکافتگی تراز در (۷ـ۴۹) به‌قاعده بازهٔ لانده معروف است و به‌طور کلی به‌هرمسئله نیروی مرکزی اعمال می‌شود . به‌عنوان مثال ، این قاعده می‌تواند در مورد الکترون ظرفیت هراتم

قلیائی، که در آن پتانسیل کولنی به‌وسیله پوشش الکترونهای داخلی تصحیح شده است، اعمال شود.

در هیدرژن، عنصرماتریسی $\langle nl|f(r)|nl\rangle$ عبارت است از

$$\langle nl|\frac{1}{r^3}|nl\rangle = \int_0^\infty R_{nl}(r)\frac{1}{r^3}R_{nl}(r)r^2\,dr$$

که در آن قرار داده‌ایم

$$f(r) = \frac{1}{e^2 r}\frac{dV}{dr} = \frac{1}{r^3}$$

R_{nl} عبارت است از ویژه تابع شعاعی هیدرژنی، پس از انتگرال‌گیری نتیجه خواهد شد*

$$\langle nl|\frac{1}{r^3}|nl\rangle = \frac{1}{a^3n^3(l+1)(l+\frac{1}{2})l} \qquad \left(a = \frac{\hbar^2}{me^2}\right)$$

بنابراین قاعده لانده برای هیدرژن می‌شود

$$\begin{aligned}\varepsilon_{nlj} &= \varepsilon_n + \frac{\hbar^2}{m^2c^2a^2}\left[\frac{1}{2}\frac{j(j+1)-l(l+1)-\frac{3}{4}}{n(l+1)(l+\frac{1}{2})l}\right]\frac{e^2}{2n^2a} \\ &= \varepsilon_n + \alpha^2|\varepsilon_n|\left[\frac{1}{2}\frac{j(j+1)-l(l+1)-\frac{3}{4}}{n(l+1)(l+\frac{1}{2})l}\right]\end{aligned} \qquad (۵۰-۷)$$

که در آن از علامتهای اختصاری زیر استفاده کرده‌ایم

$$|\varepsilon_n| = \frac{e^2}{2n^2a} = \frac{|\varepsilon_1|}{n^2} \qquad \text{و} \qquad \alpha = \frac{\hbar}{mca} = \frac{e^2}{\hbar c} \simeq \frac{1}{137}$$

جمله داخل پرانتزها از مرتبه واحد است بنابراین تصحیح نسبی ناشی از برهم‌کنش اسپین ـ مدار عبارت است از

---

* به‌کتاب زیر رجوع کنید

H.A. Bethe and E.E. Salpeter, " Quantum Mechanics of one and Two Electron Atomes", P. 17. Springer- Verlag, Berlin, 1957.

$$\frac{\varepsilon_{s-o}}{|\varepsilon_n|} = \alpha^2 \simeq \left(\frac{1}{137}\right)^2 \simeq 10^{-4}$$

به‌این دلیل، ثابت بدون بعد α ثابت *ساختار ریز* نامیده می‌شود. توجه کنیم که چون اکنون انرژی به n ، l و j بستگی دارد تبهگنی تصادفی کم شده است. تبهگنی جهتی هنوز وجود دارد.

به‌طور تجربی نتیجه شده است که تصحیحات ساختار ریز برای اتم هیدرژن تنها از نظرکیفی با (۷ــ۵۰) مطابقت می‌کنند. این نکته ازاین واقعیت ناشی می‌شودکه‌این‌تصحیحات انرژی با تصحیحات نسبیتی مرتبه اول، که در همه‌جا از آن صرفنظر کرده‌ایم، از یک مرتبه هستند. بنابراین، علاوه بر انرژی اسپین ــ مدار باید تصحیح مرتبه اول ناشی از تغییرات جرم با سرعت را نیز ملحوظ کنیم. جمله سومی نیز وجود دارد که باید ملحوظ گردد، این جمله‌کوانتومی ــ نسبیتی (جمله داروین) است و مشابه‌کلاسیکی ندارد. هرسه جمله (اسپین‌ــمدار + تغییرات جرم + جمله داروین) به‌طور کاملا" طبیعی در حد غیرنسبیتی معادله نسبیتی دیراک (فصل ۱۱) برای الکترون ظاهر می‌شوند. ترکیب اثرهای آنها، به‌جای (۷ــ۵۰)، می‌دهد

$$\varepsilon_{nj} = \varepsilon_n + \alpha^2\varepsilon_n\left[\frac{1}{n}\left(\frac{1}{j+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4n}\right)\right] \qquad (j = l \pm \tfrac{1}{2}) \qquad\qquad (۵۱-۷)$$

این فرمول ساختار ریز در فصل ۱۱ به‌دست خواهد آمد، فرمول فوق یک تبهگنی دوگانه* (علاوه بر تبهگنی m_j) نشان می‌دهد زیرا برای یک j ی معین عموما" دومقدار برای l وجود دارد $(l = j \mp \frac{1}{2})$

به‌طور خلاصه، می‌بینیم که هامیلتونی هیدرژنی کامل‌با ساختار ریز عبارت است از

$$\mathscr{H} = \mathscr{H}_{cf} + (\text{جمله‌های ساختار ریز})$$

که در آن

$$\mathscr{H}_{cf} = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r}$$

---

* در واقع این تبهگنی به‌خاطر اثرات نسبتا" پیچیدهٔ الکترودینامیک کوانتومی (جابه‌جایی لمب) قدری شکافته می‌شود.

و جملات ساختار ریز برابراند با (اسپین ــ مدار + تغییرات جرم + جمله داروین). به‌علاوه ویژه حالتهای انتخابی عبارتنداز $|nljm_j\rangle$ با انرژیهای مرتبه اول که به‌وسیله (۷ــ۵۱) داده می‌شوند.

۸ ــ اثر غیرعادی زیمن در هیدرژن

وقتی یک اتم هیدرژن وارد یک میدان مغناطیسی یکنواخت (درامتداد محور z) می‌شود هامیلتونی خواهد شد

$$\mathscr{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} + (\text{جمله‌های ساختار ریز}) + \frac{eB}{2mc}(\hat{L}_z + 2\hat{S}_z) \qquad (۷-۵۲)$$

در عمل، تصحیحات مربوط به‌ساختار ریز و میدان خارجی همیشه در مقایسه با انرژی نیروی مرکزی الکتروستاتیکی کوچک‌اند. در اصل، ملزم هستیم که یک مجموعه ناپریشیده که هم انرژی ساختار ریز و هم انرژی مغناطیسی را قطری کند انتخاب نمائیم. اما در دو مورد مهم که مورد بررسی قرار خواهند گرفت یک روش ساده‌تر کافی است. اگر جمله آخر (۷ــ۵۲) بزرگتراز انرژی ساختار ریزباشد (میدان B قوی باشد)، می‌توانیم ازانرژی اخیربکلی صرفنظر کنیم. این همان اثر پاشن ــ باک است که قبلا" در فصل ۶ مورد بحث قرار گرفت. اما اگر B به‌قدرکافی ضعیف باشد، یک مجموعه انتخابی‌ای به‌کارخواهیم برد که فقط پریشیدگیهای غالب را، که در این مورد ساختار ریز است، قطری کند. چون پیدا کردیم که این مجموعه باید $|nljm_j\rangle$ باشد، تصحیحات انرژی مربوط به‌میدان خارجی B به‌طور ساده‌خواهند شد

$$\begin{aligned}\varepsilon_B &= \frac{eB}{2mc}\langle nljm_j|\hat{L}_z + 2\hat{S}_z|nljm_j\rangle \\ &= \frac{eB}{2mc}\langle nljm_j|\hat{J}_z + \hat{S}_z|nljm_j\rangle \\ &= \frac{eB}{2mc}\{m_j\hbar + \langle nljm_j|\hat{S}_z|nljm_j\rangle\} \qquad (۷-۵۳)\end{aligned}$$

عنصر ماتریس $\langle S_z\rangle$ می‌تواند با کاربرد (۶ــ۲۴) برای بیان حالت $|nljm_j\rangle$ برحسب $|nlm_lm_s\rangle$ محاسبه شود. چون $|nlm_lm_s\rangle$ ویژه‌کتهای $\hat{S}_z$ هستند محاسبه مذکور سرراست است. یک روش‌جالب‌تر این‌است‌که مدل‌برداری را به‌کاربریم. در حالت $|nljm_j\rangle$ بردار S حول بردار J حرکت تقدیمی انجام می‌دهد. بنابراین مقدار متوسط مؤلفه S در

امتداد عمود بر J صفر می‌شود . تا آنجایی که به‌متوسطها مربوط می‌شود ، می‌توان نوشت (شکل ۷–۳)

$$\langle \mathbf{S} \rangle = \langle \mathbf{S}_J \rangle = \langle (\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{J}}_u)\hat{\mathbf{J}}_u \rangle \qquad (۵۴-۷)$$

که در آن $\hat{\mathbf{J}}_u = \hat{\mathbf{J}}/J$ برداریکه در امتداد $\hat{\mathbf{J}}$ است . با استفاده از اتحاد

$$(\hat{\mathbf{J}} - \hat{\mathbf{S}})^2 = \hat{L}^2, \qquad \hat{J}^2 - 2\hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{S}} + \hat{S}^2 = \hat{L}^2$$

یا

$$\hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{S}} = \tfrac{1}{2}(\hat{J}^2 + \hat{S}^2 - \hat{L}^2)$$

(۵۴ – ۷) خواهد شد

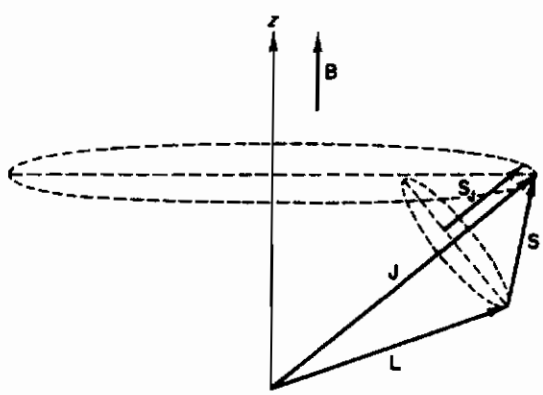
$$\langle \mathbf{S} \rangle = \left\langle \frac{(\hat{J}^2 + \hat{S}^2 - \hat{L}^2)\hat{\mathbf{J}}}{2\hat{J}^2} \right\rangle \qquad (۵۵-۷)$$

برای مولفه z خواهیم داشت

$$\langle S_z \rangle = \left\langle \left(\frac{\hat{J}^2 + \hat{S}^2 - \hat{L}^2}{2\hat{J}^2} \right) \hat{J}_z \right\rangle$$

یا

$$\langle nlsjm_j | \hat{S}_z | nlsjm_j \rangle = \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)} m_j \hbar \qquad (۵۶-۷)$$



شکل (۷–۳) بردار $\mathbf{S}_J = \frac{(\mathbf{S} \cdot \mathbf{J})\mathbf{J}}{J^2}$. توجه کنیم که برای میدانهای ضعیف B " حرکت تقدیمی " S و L حول J خیلی سریع‌تر از حرکت‌تقدیمی J حول B است .

با بازگشت به (۷–۵۳) ، نتیجه می‌گیریم که شکافتگی مغناطیسی خواهد شد

$$\varepsilon_B = \frac{eB\hbar}{2mc}\left\{1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)}\right\} m_j \qquad (۵۷-۷)$$

مناسب است که ضریب لاندهٔ " g " را به‌صورت

$$g_{\mathrm{L}} = 1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)}$$

$$= 1 \pm \frac{1}{2l+1} \quad ، \quad s = \tfrac{1}{2}, \quad j = l \pm \tfrac{1}{2} \quad \text{برای} \qquad (۵۸-۷)$$

تعریف کنیم که برحسب آن (۷–۵۷) می‌تواند به‌صورت زیر نوشته شود

$$\varepsilon_B = \mu_B B g_{\mathrm{L}} m_j$$

پارامتر g_{L} عملا" عبارت است از ضریب ژیرو مغناطیسی مؤثر وابسته به J و تابع نحوه پیوند بین L و S است . اگر $l = 0$ باشد داریم $g_{\mathrm{L}} = g_s = 2$ ، اگر $s = 0$ باشد داریم $g_{\mathrm{L}} = g_l = 1$.

ترازهای انرژی برای الکترون هیدرژنی در حضور یک میدان ضعیف B خواهند شد (شکل (۷–۴))

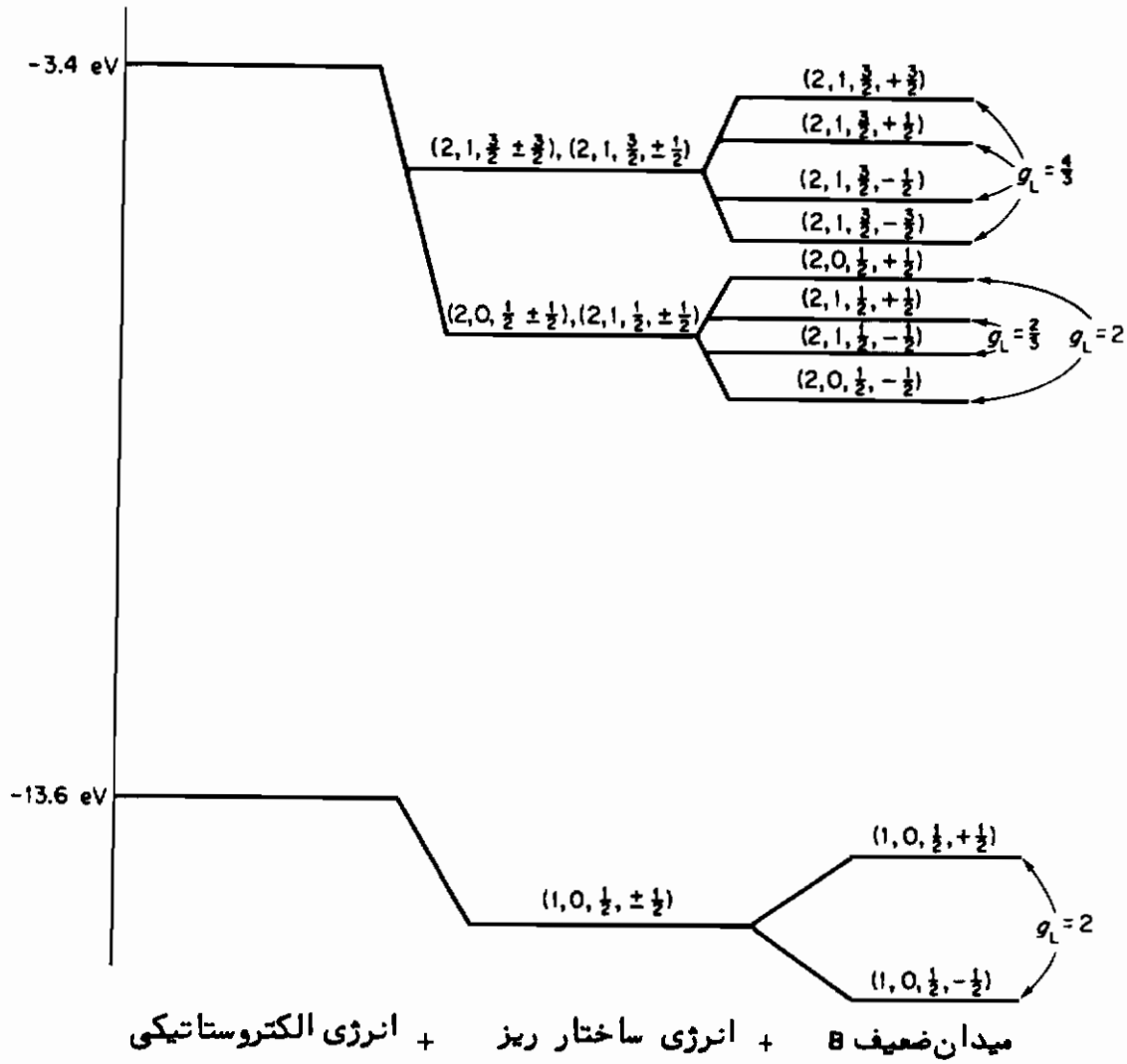
$$\varepsilon_{njlm_j} = \varepsilon_n + \alpha^2\varepsilon_n\left\{\frac{1}{n}\left(\frac{1}{j+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4n}\right)\right\} + \mu_B B g_{\mathrm{L}} m_j \qquad (۵۹-۷)$$

معادله (۷–۵۸) نشان می‌دهد که برای هر j ی معین دومقدار متفاوت برای g_{L} وجود دارد $(l = j \mp \frac{1}{2})$. این امر منجر به‌شکافتگیهای نابرابری در زیر ترازهای مغناطیسی m_j می‌شود . به‌این دلیل ، این اثر به‌نام اثر غیرعادی زیمن نامیده می‌شود .وقتی که میدان از یک‌میدان ضعیف به‌یک میدان قوی افزایش می‌یابد ، به‌تدریج طیف غیرعادی زیمن تبدیل به‌طیف پاشن ــ باک ، (۶–۳۸) ، می‌شود . بررسی حالت واسطه‌که درآن انرژیهای مغناطیسی‌واسپین‌ــ مداری از یک مرتبه هستند خارج از سطح این کتاب است ، بحث این حالت می‌تواند در هر مقاله پیشرفته‌ای در مورد طیف‌های اتمی یافت شود*.

---

* به‌عنوان مثال به‌کتاب زیر مراجعه کنید .

E.u. Condon and G.H. Shorteley, " The Theory of Atomic Spectra", P. 152. Cambridge Univ. Press, London and New York , 1935.



شکل (۷ــ۴) اثر غیرعادی زیمن (در هیدرژن) . پرانتزها معرف $(nljm_j)$ می‌باشند .

۹ ــ نظریه پریشیدگی وابسته به‌زمان

وقتی سیستم فیزیکی موردنظر به‌وسیله هامیلتونی ناپریشیده $\mathscr{H}_0$ نمایش داده می‌شود، معمول است که پریشیدگی $\lambda \mathscr{V}$ به‌عنوان القاءکنندهٔ گذارهایی بین حالات ناپریشیده $|\varepsilon_i{}^0\rangle$ در نظر گرفته شود . از (۳ــ۶۶) نتیجه می‌شود که عملگر تحول کل برای سیستم ما در معادله انتگرالی

$$\hat{U}(t, t_0) = 1 + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} \mathscr{H}(\tau_1)\hat{U}(\tau_1, t_0)\, d\tau_1 \qquad \text{(۷ــ۶۰ الف)}$$

که در آن

$$\mathscr{H}(t) = \mathscr{H}_0 + \lambda \mathcal{V}(t) \qquad \text{و} \qquad t > t_0$$

است ،صدق می‌کند . درمورد خاصی که پریشیدگی مستقل از زمان است ، جواب (۷ــ۶۰الف) خواهد شد

$$\mathcal{O}(t, t_0) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\mathscr{H}(t - t_0)\right] \qquad (۷ــ۶۰ب)$$

که در آن $\mathscr{H} = \mathscr{H}_0 + \lambda \mathcal{V}$. ما به‌نحوه تحول حالتهای ناپریشیده $\mathscr{H}_0$ تحت تأثیر عملگر (۷ــ۶۰) علاقه‌مند خواهیم بود . به‌این دلیل مناسب است که $\mathcal{O}(t, t_0)$ را برحسب عملگر تحول ناپریشیده

$$\mathcal{O}^{(0)}(t, t_0] = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\mathscr{H}_0(t - t_0)\right]$$

بیان کنیم . وسوسه‌انگیز است که این کار را با نوشتن (۷ــ۶۰ب) به‌صورت

$$\mathcal{O}(t, t_0) = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}[\mathscr{H}_0 + \lambda\mathcal{V}](t - t_0)\right\} = \mathcal{O}^{(0)}(t - t_0)\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\lambda\mathcal{V}(t - t_0)\right\} \qquad (۶۱ - ۷)$$

انجام دهیم . تأکید می‌کنیم که (۷ــ۶۱) کاملا" نادرست است زیرا $\mathscr{H}_0$ و $\mathcal{V}$ جابه‌جاپذیر نیستند و اتحاد $e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}$ فقط وقتی معتبراست که $\hat{A}$ و $\hat{B}$ جابه‌جاپذیر باشند .

ربط دادن $\mathcal{O}$ به $\mathcal{O}^{(0)}$ با یک تابع تحلیلی عملا" غیر ممکن است . با این وجود ، اگر λ کوچک باشد ، با یک سری پریشیده از توانهای λ معمولا" امکان‌پذیر است . به‌دست‌آوردن ریاضیاتی یک چنین سری پیچیده‌تر از آن است که در اینجا نمایش داده شود ، بنابر این ما فقط نتایج را ارائه می‌کنیم* . سری مزبور به‌صورت

$$\mathcal{O}(t, t_0) = \mathcal{O}^{(0)}(t, t_0) + \sum_{n=1}^{\infty} \mathcal{O}^{(n)}(t, t_0) \qquad (۶۲ - ۷)$$

---

* برای به‌دست‌آوردن این سری به‌کتاب زیر مراجعه کنید

A. Messiah, " Quantum Mechanics," Volume II, PP. 722-724, Wiley, New York, 1962.

هم‌چنین به‌پیوست ب از کتاب حاضر نیز رجوع کنید .

در می‌آید که در آن

$$\mathcal{O}^{(n)} = \left(\frac{\lambda}{i\hbar}\right)^n \int_{t_0}^{t} d\tau_n \int_{t_0}^{\tau_n} d\tau_{n-1} \cdots \int_{t_0}^{\tau_2} d\tau_1$$
$$\times\, \mathcal{O}^{(0)}(t, \tau_n)\, \mathcal{V}(\tau_n) \mathcal{O}^{(0)}(\tau_n, \tau_{n-1}) \cdots \mathcal{O}^{(0)}(\tau_2, \tau_1)\, \mathcal{V}(\tau_1) \mathcal{O}^{(0)}(\tau_1, t_0)$$

معادله (۷ــ۶۲) نمایش دقیقی از جواب (۷ــ۶۰ الف) است به‌شرط اینکه سری همگرا باشد. این سری وقتی λ کوچک باشد، به‌طوری‌که چند جمله اول تقریب خوبی را به‌ما بدهند، خیلی مفید خواهد بود. وقتی $\lambda \to 0$، $\mathcal{O}$ به $\mathcal{O}^{(0)}$ تقلیل پیدا می‌کند.

به‌ترتیب انتگرالهای زمانی برای جمله مرتبه n ام $\mathcal{O}^{(n)}$، یعنی، $\tau_n > \tau_{n-1}$، توجه کنیم. این نکته به‌این واقعیت مربوط می‌شود که، از نظر غیرنسبیتی، تحول با گذشت زمان فقط به پیش می‌رود. در وضعیتهای نسبیتی به‌پدیده‌هائی که در جهت منفی زمان انتشار می‌یابند می‌توان مفهوم فیزیکی نسبت داد*.

۱۰ ــ گذارهای القاء شده به‌وسیله یک پریشیدگی ثابت

نخست موردی را در نظر بگیریم که در آن $\mathcal{V}$ مستقل از زمان باشد. به‌علاوه فرض کنیم که سیستم در آغاز (در $t = t_0$) در یکی از ویژه حالتهای $\mathscr{H}_0$، مثلاً $|\varepsilon_i^0\rangle$، باشد. این تحول حالت به‌وسیله

$$|\beta_i, t\rangle = \mathcal{O}(t, t_0)|\varepsilon_i^0\rangle$$

داده می‌شود. از (۷ــ۶۰) آشکار است که وقتی $\mathcal{V}$ مستقل از زمان است، عملگر تحول تابعی از بازهٔ زمانی $\tau = t - t_0$ است، یعنی

$$\mathcal{O}(t, t_0) = \mathcal{O}(\tau).$$

احتمال مشاهده سیستم در یک ویژه حالت دیگر $\mathscr{H}_0$، مثلاً $|\varepsilon_j^0\rangle$، پس از گذشت زمان τ با رابطه

---

* به‌عنوان مثال، به‌کتاب زیر مراجعه کنید

R.P. Feynman, The Theory of Positrons, phys. Rev. 76, 764 (1949).

$$\mathscr{P}_{ij}(\tau) = |\langle \varepsilon_j{}^0 | \beta_i\, t\rangle|^2 = |\langle \varepsilon_j{}^0 | \hat{U}(\tau) | \varepsilon_i{}^0\rangle|^2 \qquad (۶۳-۷)$$

داده می‌شود . به‌طورمعادل ،احتمال‌گذار ازحالت i به‌حالت j به‌وسیله مجذور عنصر متناظر ماتریس عملگر تحول داده می‌شود . به‌تقارن‌نسبت به‌تعویض i و j توجه کنید . این نکته برگشت‌پذیری میکروسکوپیکی فرایند را نشان می‌دهد .

سپس رفتاراین احتمال‌گذار را وقتی بازه زمانی به‌بینهایت میل می‌کند بررسی‌می‌کنیم . *آهنگ‌گذار* بین حالت $\varepsilon_i{}^0$ و $\varepsilon_j{}^0$ را به‌صورت

$$R_{ij} = \lim_{\tau\to\infty} \frac{d\mathscr{P}_{ij}(\tau)}{d\tau} = \lim_{\tau\to\infty} \frac{d}{d\tau} |\langle \varepsilon_j{}^0 | \hat{U}(\tau) | \varepsilon_i{}^0\rangle|^2 \qquad (۶۴-۷)$$

تعریف می‌کنیم . با استفاده از نمایش $\hat{U}(\tau)$ به‌صورت سری ، (۷–۶۲) ،آهنگ‌گذار را به‌صورت

$$R_{ij} = \lim_{\tau\to\infty} \frac{d}{d\tau} \left\{ \left| \langle \varepsilon_j{}^0 | \hat{U}^0 | \varepsilon_i{}^0\rangle + \langle \varepsilon_j{}^0 | \sum_{n=1}^{\infty} \hat{U}^{(n)} | \varepsilon_i{}^0\rangle \right|^2 \right\} \qquad (۶۵-۷)$$

به‌دست می‌آوریم . با این همه ، با استفاده از

$$\begin{aligned} \langle \varepsilon_j{}^0 | \hat{U}^0 | \varepsilon_i{}^0\rangle &= \langle \varepsilon_j{}^0 | \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \mathscr{H}(t-t_0) \right] | \varepsilon_i{}^0\rangle \\ &= \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \varepsilon_i{}^0 (t-t_0) \right] \langle \varepsilon_j{}^0 | \varepsilon_i{}^0\rangle \end{aligned}$$

و با به‌خاطر داشتن اینکه وقتی $j \neq i$ باشد داریم $\langle \varepsilon_j{}^0 | \varepsilon_i{}^0\rangle = 0$ ،نتیجه می‌گیریم

$$R_{ij} = \lim_{\tau\to\infty} \frac{d}{d\tau} \left\{ \left| \langle \varepsilon_j{}^0 | \sum_{n=1}^{\infty} \hat{U}^{(n)}(\tau) | \varepsilon_i{}^0\rangle \right|^2 \right\} \qquad (۶۶-۷)$$

آهنگ کلی‌گذار از حالت i به‌حالت j شامل مجذور حاصل‌جمع بینهایت جمله است ، که جمله n ام آن متناسب است با λ^n . وقتی $\lambda \to 0$ ، نتیجه می‌گیریم $R_{ij} \to 0$ و گذار متوقف می‌شود . *بنابراین تنها عامل گذارها پدیدهٔ پریشیدگی است* . نخست موردی را در نظر می‌گیریم‌که در آن λ آنقدر کوچک است که تنها جمله $n = 1$ محتاج به‌نگاهداری‌است .این مطلب مستقیما" منجر به‌آنچه که *قاعده طلائی* فرمی خوانده می‌شود ، می‌گردد .

۱۱ ــ گذارهای مرتبه اول ــ قاعده طلائی فرمی

آهنگ گذار مرتبه اول از (۷ــ۶۶) با استفاده از فقط جمله $n = 1$ به‌دست می‌آید . به‌این نتیجه می‌رسیم که این آهنگ باید عبارت باشد از

$$R_{ij} = \lim_{\tau\to\infty} \frac{d}{d\tau} \left|\langle \varepsilon_j{}^0 | \hat{U}^{(1)}(\tau) | \varepsilon_i{}^0 \rangle\right|^2 \qquad (\tau = t - t_0) \qquad (۶۷ - ۷)$$

با استفاده از (۷ــ۶۲) داریم (برای $\hat{V}$ ی مستقل از زمان)

$$\begin{aligned} \hat{U}^{(1)} &= \frac{\lambda}{i\hbar} \int_{t_0}^{t} d\tau_1\, \hat{U}^{(0)}(t, \tau_1)\, \hat{V}\, \hat{U}^{(0)}(\tau_1, t_0) \\ &= \frac{\lambda}{i\hbar} \int_{t_0}^{t} d\tau_1 \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\mathscr{H}_0(t-\tau_1)\right] \hat{V} \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\mathscr{H}_0(\tau_1 - t_0)\right] \end{aligned}$$

بنابراین آهنگ گذار مرتبه اول در (۷ــ۶۷) می‌تواند به‌صورت

$$\begin{aligned} R_{ij} = \lim_{\tau\to\infty} \frac{d}{d\tau} \Bigg| \langle \varepsilon_j{}^0 | \frac{\lambda}{i\hbar} \int_{t_0}^{t} d\tau_1 \\ \times \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\mathscr{H}_0(t-\tau_1)\right] \hat{V} \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\mathscr{H}_0(\tau_1 - t_0)\right] | \varepsilon_i{}^0 \rangle \Bigg|^2 \end{aligned}$$

نوشته شود . با استفاده از رابطه

$$\exp\left[\frac{i}{\hbar}\mathscr{H}_0(\tau_1 - t_0)\right] | \varepsilon_i{}^0 \rangle = \exp\left[\frac{i}{\hbar}\varepsilon_i{}^0(\tau_1 - t_0)\right] | \varepsilon_i{}^0 \rangle$$

پس از قدری مرتب‌کردن ، داریم

$$\begin{aligned} R_{ij} = \frac{\lambda^2}{\hbar^2} \lim_{\tau\to\infty} \frac{d}{d\tau} \Bigg| \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(\varepsilon_j{}^0 t - \varepsilon_i{}^0 t_0)\right] \langle \varepsilon_j{}^0 | \hat{V} | \varepsilon_i{}^0 \rangle \\ \times \int_{t_0}^{t} \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\varepsilon_j{}^0 - \varepsilon_i{}^0)\tau_1\right] d\tau_1 \Bigg|^2 \end{aligned}$$

انتگرال ساده و سرراست است و به‌عنوان تمرین واگذار می‌شود (رک مسئله ۷ــ۱۰) که نشان

دهید نتیجه می‌تواند به‌صورت

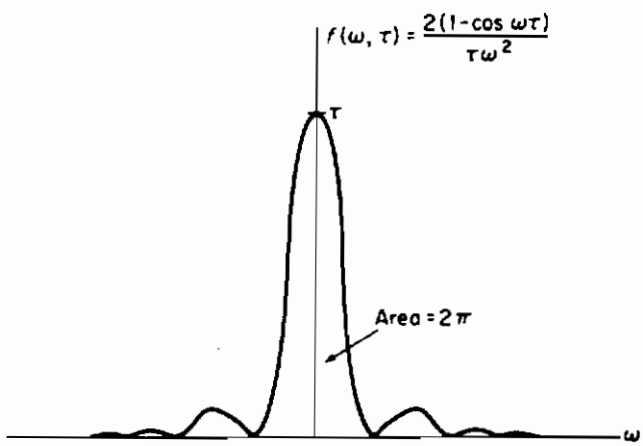
$$R_{ij} = \frac{\lambda^2}{\hbar^2} |V_{ji}|^2 \lim_{\tau \to \infty} \frac{d}{d\tau} g(\omega_{ji}, \tau) \qquad (۶۸-۷)$$

ساده شود که در آن

$$g(\omega, \tau) = \frac{2(1 - \cos \omega\tau)}{\omega^2} \qquad \text{و} \qquad \omega_{ji} = \frac{\varepsilon_j^0 - \varepsilon_i^0}{\hbar}$$

نخست رفتار تابع $g(\omega, \tau)$ را به‌منظور درک معنی آن مطالعه می‌کنیم . با وارد کردن تابع کمکی $f(\omega, \tau) = g(\omega, \tau)/\tau$ ، می‌بینیم‌که $f(\omega, \tau)$ به‌ازای τ ی ثابت‌یک تابع نوسانی از ω است (شکل۷ـ۵) . قله آن در $\omega = 0$ است و مقدار بیشینه در آنجا عبارت است از*

$$f(0, \tau) = \lim_{\omega \to 0} \frac{2(1 - \cos \omega\tau)}{\tau\omega^2} \to \tau$$



شکل (۷ـ۵) تابع $f(\omega, \tau)$

بنابراین قله تابع $f(\omega, \tau)$ با افزایش τ به‌سمت بینهایت میل می‌کند .
سطح زیر منحنی برابر است با

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(\omega, \tau)\, d\omega = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{2(1 - \cos \omega\tau)}{\tau\omega^2}\, d\omega = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{2(1 - \cos \theta)}{\theta^2}\, d\theta = 2\pi$$

---

* این شکل مبهم می‌تواند به‌سادگی با استفاده از قاعدهٔ هوپیتال محاسبه شود .

که در آن قرار داده‌ایم $\theta = \omega\tau$. نکته مهم این است که سطح زیرمنحنی مستقل از τ است. در نتیجه وقتی $\tau \to \infty$ ، قله مرکزی بالا می‌رود و پهنای منحنی در شکل (۷ــ۵) در حوالی $\omega = 0$ کاهش می‌یابد به‌طوری که مساحت زیر منحنی ثابت بماند. اما این دقیقا" همان خاصیت تابع دلتا است و می‌توان برابرسازی زیر را انجام داد

$$\lim_{\tau\to\infty} f(\omega, \tau) = 2\pi\delta(\omega) \qquad \text{یا} \qquad \lim_{\tau\to\infty} g(\omega, \tau) = 2\pi\tau\delta(\omega)$$

بالاخره آهنگ‌گذار در (۷ــ۶۸) می‌شود*

$$R_{ij} = \frac{2\pi\lambda^2}{\hbar^2} |V_{ji}|^2 \delta(\omega_{ji}) \qquad \left(\omega_{ji} = \frac{\varepsilon_j{}^0 - \varepsilon_i{}^0}{\hbar}\right)$$

$$= \frac{2\pi\lambda^2}{\hbar} |V_{ji}|^2 \delta(\varepsilon_j{}^0 - \varepsilon_i{}^0) \qquad (۶۹ - ۷)$$

بنابراین آهنگ‌گذار تنها بین حالتهای هم انرژی، یعنی $\varepsilon_j{}^0 = \varepsilon_i{}^0$ ، غیرصفر است. نتیجه می‌گیریم که یک پریشیدگی ایستا (مستقل اززمان) تنها باعث گذارهایی می‌شود که انرژی را پایسته نگاه می‌دارند و نه به‌سیستم ناپریشیده انرژی می‌افزاید و نه از آن می‌کاهد.

توجه خودرا به‌گذارهائی معطوف می‌کنیم‌که حالت نهائی قسمتی از یک پیوستارباشد. این مطلب بخصوص در فرایندهای پراکندگی که درآنها پتانسیل پریشیدگی مسئول گذارهای بین حالتهای ذرات آزاد است مهم است. حالتهای اخیر، البته، جزو طیف پیوسته‌اند. عموما"، فرایندهای اساسی ازقبیل واکنشهای شیمیائی وهسته‌ای وبرهم‌کنشهای‌فوتوالکتریکی شامل حالتهائی هستند که در طیف پیوسته قرار دارند.

دراینجاحالتهارا به‌جای $|\varepsilon_i{}^0\rangle$ و $|\varepsilon_j{}^0\rangle$ با نمادهای $|\mathbf{n}\rangle$ و $|\mathbf{m}\rangle$ نمایش می‌دهیم و با استفاده از نمادگذاریهای قراردادی، (۷ــ۶۹) را به‌صورت

$$R_{\mathbf{nm}} = \frac{2\pi\lambda^2}{\hbar} \int |\langle \mathbf{m}|\hat{V}|\mathbf{n}\rangle|^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{m}} - \varepsilon_{\mathbf{n}})\, d\mathbf{m}$$

بازنویسی می‌کنیم. وجود انتگرال لازم است زیرا در طیف پیوسته باید آهنگ کلی‌گذار به‌یک گروه از حالتهای نهائی $|\mathbf{m}\rangle$ ، به‌جای یک حالت تک‌گسسته، را در نظر بگیریم.

انتگرال فوق می‌تواند با استفاده از

$$d\mathbf{m} = \rho(\mathbf{m})\, d\varepsilon_{\mathbf{m}} \qquad (۷۰ - ۷)$$

---

* تابع دلتا دارای خاصیت $\delta(ax) = |a|^{-1}\delta(x)$ است.

به‌انتگرالی روی انرژی (به‌جای انتگرال روی حالتهای نهایی) تبدیل شود. در این رابطه $\rho(\mathbf{m}) = d\mathbf{m}/d\varepsilon_{\mathbf{m}}$ بیانگر تعداد حالتهای پیوستار بر واحد بازهٔ انرژی، یعنی، *چگالی حالتها* است. در نهایت، آهنگ‌گذار خواهد شد

$$R_{\mathbf{nm}} = \frac{2\pi\lambda^2}{\hbar} \int |\langle \mathbf{m}|\hat{V}|\mathbf{n}\rangle|^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{m}} - \varepsilon_{\mathbf{n}})\rho(\mathbf{m})\, d\varepsilon_{\mathbf{m}}$$

یا، با استفاده از خاصیت غربالی تابع دلتا،

$$R_{\mathbf{nm}} = \frac{2\pi\lambda^2}{\hbar} [|V_{\mathbf{mn}}|^2 \rho(\mathbf{m})]_{\varepsilon_{\mathbf{m}} = \varepsilon_{\mathbf{n}}} \qquad (۷-۷۱)$$

معادله (۷-۷۱) همان *قاعده طلائی فرمی* است و بیان می‌دارد که آهنگ‌گذار $R_{\mathbf{nm}}$:

(الف) فقط بین حالتهای پیوستهٔ هم‌انرژی غیرصفر است.

(ب) متناسب با مجذورعنصر ماتریس پریشیدگی‌ای است‌که این حالتها را به‌یکدیگر می‌پیوندد.

(ج) متناسب با چگالی حالتهای نهائی است.

در فصل ۸، قاعده طلائی را به‌مسائل پراکندگی که در آنها پتانسیل پراکندگی به‌عنوان یک پریشیدگی که باعث گذار از یک ویژه حالت اولیهٔ تکانه، $|\mathbf{k}\rangle$، به یک ویژه حالت نهائی، $|\mathbf{k}'\rangle$، می‌شود اعمال خواهیم‌کرد. تغییر دربردار تکانه (که انرژی‌آن‌تغییر نکرده است) بیانگر پراکندگی کشسان است و آهنگ پیشگویی‌شده به‌وسیله (۷-۷۱) ارتباط خیلی نزدیکی با مقطع مؤثر دارد.

۱۲ ـ تصحیحات مرتبه‌های بالاتر قاعده طلائی

قاعده طلائی‌فرمی (۷-۷۱) بااستفاده‌ازتنها جمله مرتبه‌اول بسط عملگرتحول‌به‌دست آمد. غالبا" نظریه مرتبه اول ناکافی است. به‌دست‌آوردن جملات مرتبه بالاتر برای منظور ما خیلی پیچیده است. اما، نتیجه آن به‌قرار زیر است*

---

* برای بحث در باره (۷-۷۲) به‌کتاب زیر مراجعه کنید

L.P. Landau and E.M. Lifshitz, " Quautum Mechanics," 2nd ed., Section 43. Addison-Wesley, Reading, Massachusetts 1965.

$$R_{\mathbf{nm}} = \frac{2\pi}{\hbar}\left[\left|\sum_{j=1}^{\infty}\lambda^j M_{\mathbf{nm}}^{(j)}\right|^2 \rho(\mathbf{m})\right]_{\varepsilon_n=\varepsilon_m} \qquad (۷۲-۷)$$

که در آن

$$M_{\mathbf{nm}}^{(1)} = V_{\mathbf{nm}}$$
$$M_{\mathbf{nm}}^{(2)} = \int \frac{V_{\mathbf{nl}} V_{\mathbf{lm}}\, d\mathbf{l}}{\varepsilon_{\mathbf{m}} - \varepsilon_{\mathbf{l}}}$$
$$M_{\mathbf{nm}}^{(3)} = \int \frac{V_{\mathbf{nl}} V_{\mathbf{ll'}} V_{\mathbf{l'm}}\, d\mathbf{l}\, d\mathbf{l'}}{(\varepsilon_{\mathbf{m}} - \varepsilon_{\mathbf{l}})(\varepsilon_{\mathbf{m}} - \varepsilon_{\mathbf{l'}})}$$
$$\vdots$$

$M^{(j)}$ ها دامنه‌های گذار نامیده می‌شوند. هر دامنه در λ^j ضرب می‌شود و برای پریشیدگیهای به‌حد کافی ضعیف تنها چند دامنه اول در (۷–۷۲) کافی است. اگر اتفاقا" $M_{\mathbf{nm}}^{(1)}$ صفر شود (این مورد گاهی اوقات پیش می‌آید)، جمله عمده (مرتبه دوم) در قاعده طلائی می‌دهد

$$R_{\mathbf{nm}} = \frac{2\pi}{\hbar}\left[\lambda^4 |M_{\mathbf{nm}}^{(2)}|^2 \rho(\mathbf{m})\right]_{\varepsilon_n=\varepsilon_m} \qquad (۷۳-۷)$$

معمولا" لازم نخواهد بود که از مرتبه اول فراتر رویم.

اهمیت قاعده طلائی فرمی، (۷ – ۷۱) و (۷ – ۷۲)، در کاملا" عمومی بودن آن است. توجه کنیم که در هیچ کجا نمایش مختصه‌ای (مکانیک موجی) در به‌دست آوردن آن به‌کار نرفته است. تعدادی از فرایندهای بنیادی پراکندگی وجود دارد که در آنها $\mathbf{r}$ مشاهده‌پذیر مناسبی نیست.

یک مثال خیلی مهم که قبلا" نیز مورد بررسی قرار گرفته است برهم‌کنش وابسته به‌اسپین است. در پراکندگی هسته‌ای، نیروهای وابسته به‌اسپین نقش مهمی بازی می‌کنند. یک مثال دیگر در برهم‌کنشهای فوتوالکتریکی، یعنی، پراکندگی فوتونها و الکترونها، رخ می‌دهد. همان‌طور که در فصل ۱۲ خواهیم دید، کوانتش میدان تابشی که مستقیما" منجر به‌مفهوم فوتونی می‌شود عملگر $\mathbf{p}$ را در بر ندارد. در این مثال فوق‌الذکر مکانیک موجی برای توصیف کامل پراکندگی یا فرایند گذار نامناسب است. اما قاعده طلائی فرمی کاملا" عمومی است و محتملا" متداول‌ترین فرمول برای محاسبه آهنگهای گذار (یا مقطع مؤثر) در فرایندهای بنیادی است.

۱۳ ــ گذارهای القاء شده به‌وسیله یک پریشیدگی هماهنگ

یکی از معمول‌ترین راههای القاء گذار بین حالتهای مانای یک سیستم کوانتومی اعمال یک پریشیدگی هماهنگ است . به‌عنوان مثال ،میدانهای الکتریکی و مغناطیسی نوسانی وابسته به‌نور می‌توانند باعث گذار بین حالتهای مانا در اتمها شوند .

رابطه (۷ــ۶۴) را در مورد گذارهای بین حالتهای‌گسسته $|\varepsilon_i\rangle$ و $|\varepsilon_j\rangle$ که به‌وسیله‌یک پریشیدگی هماهنگ به‌شکل

$$\lambda\hat{V} = \lambda\hat{V}(\mathbf{r}) \cos \omega t = \lambda\hat{V}(\mathbf{r})\tfrac{1}{2}(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})$$

القاء شده‌اند به‌کار خواهیم برد . روشها اصولا" شبیه به‌روشهایی هستند که در مورد مستقل از زمان به‌کار رفتند . آهنگ‌گذاربا مقایسه با (۷ــ۶۹) عبارت است از

$$R_{ij}(\omega) = \frac{2\pi\lambda^2}{\hbar^2} |V_{ij}|^2 \frac{1}{2} [\delta(\omega_{ji} - \omega) + \delta(\omega_{ji} + \omega)] \qquad (۷۴ - ۷)$$

آهنگ‌گذارتابع فرکانس است و به‌جز در $\omega = |\omega_{ji}|$ صفر است .این مثالی‌ازتشدید مکانیک کوانتومی است که در آن سیستم کوانتومی متاثر نمی‌شود مگر اینکه فرکانس پریشیده کاملا" بر یکی از فرکانسهای برانگیختگی

$$\omega = |\omega_{ji}| = \frac{|\varepsilon_j - \varepsilon_i|}{\hbar}$$

"منطبق" شود .

در عمل غیرممکن است یک موج تکرنگ واقعی ایجاد کرد . از این‌رو پریشیدگی معمولا" به‌شکل یک بسته موج

$$\lambda\hat{V}(\mathbf{r}, t) = \lambda\hat{V}(\mathbf{r}) \int_0^\infty A(\omega) \cos \omega t \, d\omega$$

است که نمایشگر برهم‌نهشی از فرکانسهای مختلف‌است .بنابراین آهنگ‌گذار کل‌باید به‌صورت انتگرالی روی فرکانسهای فرودی نوشته شود ، یعنی ،

$$R_{ij} = \frac{2\pi\lambda^2}{\hbar^2} |V_{ij}|^2 \frac{1}{2} \int_0^\infty |A(\omega)|^2 [\delta(\omega_{ji} - \omega) + \delta(\omega_{ji} + \omega)] \, d\omega \qquad (۷۵ - ۷)$$

اگر $\varepsilon_j > \varepsilon_i$ باشد $(\omega_{ji} > 0)$ ،تابع دلتای دوم صفر می‌دهد و خاصیت غربالی‌تابع دلتای

اول می‌دهد

$$R_{ij} = \frac{2\pi\lambda^2}{\hbar^2} |V_{ij}|^2 \frac{1}{2} |A(\omega_{ji})|^2 \qquad (\varepsilon_j > \varepsilon_i) \qquad (۷۶-۷)$$

آهنگ‌گذار در (۷ـ۷۶) فرایندی را توصیف می‌کند که در آن سیستم کوانتومی از یک حالت با انرژی پائین‌تر به‌یک‌حالت با انرژی‌بالاتر می‌رود : این فرایند فرایند جذب *القائی* است که در آن انرژی از چشمه پریشنده به‌سیستم منتقل می‌شود . در اینجا آهنگ متناسب‌باشدت (مجذور دامنه) پریشیدگی در فرکانس تشدیدگر ω_{ji} و با مجذور عنصر ماتریس $|V_{ij}|^2$ است .

اگر $\varepsilon_j < \varepsilon_i$ باشد $(\omega_{ji} < 0)$ ، تابع دلتای اول صفر می‌دهد و تابع دلتای دوم می‌دهد

$$R_{ij} = \frac{2\pi\lambda^2}{\hbar^2} |V_{ij}|^2 \frac{1}{2} |A(\omega_{ji})|^2 \qquad (\varepsilon_j < \varepsilon_i) \qquad (۷۷-۷)$$

بنابراین آهنگ‌گسیل *القائی* با آهنگ جذب بین دو تراز یکسان است . این ارتباط مثالی است از *اصل برگشت‌پذیری میکروسکوپیکی* .

بنابراین وقتی یک سیستم در معرض یک پریشیدگی هماهنگ شامل فرکانس $\omega = |\omega_{ji}|$ قرار گیرد ، گذارهائی بین ترازهای ε_j و ε_i القاء می‌شوند . در مورد جذب ، گذارها با یک افزایش در انرژی سیستم کوانتومی همراه‌است ، سرچشمه این انرژی همان پریشیدگی است . برای گسیل ، انرژی به‌چشمه پریشنده داده می‌شود . اگر عنصر ماتریسی که حالات را به‌هم ربط می‌دهد صفر شود ، گذار اتفاق نمی‌افتد (در مرتبه اول) و اصطلاحا" گفته می‌شود که گذار ممنوع است .

۱۴ ـ گذارهای تابشی در هیدرژن

روابط (۷ـ۷۶) و (۷ـ۷۷) را به‌گذارهایی در هیدرژن که به‌وسیله تابش الکترومغناطیسی حرارتی (جسم سیاه) القاء می‌شوند اعمال می‌کنیم . اگر طول موج تابش در مقایسه با ابعاد سیستم اتمی بزرگ باشد* ، از تغییرات فضائی‌میدان الکتریکی درتقریب اول می‌توان‌صرفنظر

---

* ابعاد یک اتم در حدود $d \sim 10^{-8}$ cm است در حالی که تابش موردتوجه معمولا" دارای طول موج $\lambda \sim 10^{-5}$ cm می‌باشد .

کرد . دراین صورت پریشیدگی معادل است با یک میدان الکتریکی نوسانی یکنواخت* $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \cos \omega t$. پتانسیل پریشنده شبیه به‌پتانسیلی‌است‌که دراثراستارک‌وجودداشت‌یعنی ، $\lambda \hat{V} = e\mathbf{E} \cdot \mathbf{r} = e\mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{r} \cos \omega t$ ، که در آن ω فرکانس تابش فرودی است .چون $\mathbf{p} = -e\mathbf{r}$ معرف گشتاور دوقطبی اتم هیدرژن است ، بنابراین ما تقریبی را اعمال کرده‌ایم که تقریب *دوقطبی الکتریکی* نامیده می‌شود . این تقریب نیز تنها وقتی معتبر است که طول موج تابش در مقایسه با ابعاد اتم بزرگ باشد .

آهنگ جذب و گسیل القائی می‌شود

$$R_{ij} = \frac{2\pi e^2}{\hbar^2} \frac{1}{2} |\mathbf{E}_0(\omega_{ij}) \cdot \langle i|\mathbf{r}|j\rangle|^2 \qquad (۷۸-۷)$$

چون تابش حرارتی (جسم سیاه) به‌طور کاتوره‌ای قطبی شده است باید روی سه مؤلفهٔ $\mathbf{E}$ متوسط گرفت و نوشت

$$R_{ij} = \frac{2\pi e^2}{\hbar^2} \frac{1}{2} \frac{|E_0(\omega_{ij})|^2}{3} |\langle i|\mathbf{r}|j\rangle|^2 \qquad (۷۹-۷)$$

که در آن

$$|\langle i|\mathbf{r}|j\rangle|^2 = |x_{ij}|^2 + |y_{ij}|^2 + |z_{ij}|^2$$

چگالی انرژی تابشی به‌وسیله رابطه $\rho_{\text{rad}} = (|E|^2/4\pi)$ به‌میدان الکتریکی مربوط می‌شود، به‌طوری که آهنگ در نهایت خواهد شد

$$R_{ij} = \frac{4\pi^2 e^2}{3\hbar^2} \rho_{\text{rad}}(\omega_{ij}) |\langle i|\mathbf{r}|j\rangle|^2 \qquad (۸۰-۷)$$

بنابراین گذارهای تابشی تنها در صوتی در مرتبه اول رخ می‌دهند که

(الف) تابش با فرکانس برانگیختگی موجود باشد ، و

(ب) عنصر ماتریس $\langle i|\mathbf{r}|j\rangle$ صفر نباشد .

شرط (ب) منجر به‌قواعدی می‌شود که اصطلاحا "*قواعد گزینش* نامیده می‌شوند و برگذارهای مجاز و ممنوع حاکمند . به‌عنوان مثال ، در یک مسئله نیروی مرکزی که‌درآن‌کتهای $|nlm_l m_s\rangle$ سیستم را مشخص می‌کنند ، گذارها تنها بین حالتهایی رخ می‌دهند که در آنها عنصر ماتریس ، $\langle n'l'm_l'm_s'|\mathbf{r}|nlm_l m_s\rangle$ ، صفر نباشد .

---

* در این تقریب *دوقطبی الکتریکی* اثرات میدان مغناطیسی قابل اغماض است .

عنصر ماتریس دوقطبی عبارت است از

$$z_{ij} = \int \psi^*_{n'l'm_l'm_s'} r\cos\theta \psi_{nlm_lm_s} d\mathbf{r}$$
$$= \int R_{n'l'} r R_{nl} r^2 dr \int_{-1}^{1} du\, P_{l'm_l'}(u) u P_{lm_l}(u) \int_0^{2\pi} e^{-im_l'\phi} e^{im_l\phi} d\phi \langle m_s' | m_s \rangle \qquad (۸۱-۷)$$

دو حاصلضرب آخر نشان می‌دهند که

$$z_{ij} \propto \delta_{m_lm_l'} \delta_{m_sm_s'}$$

بنابراین z_{ij} فقط برای گذارهایی وجود دارد که در آنها $\Delta m_l = 0$ و $\Delta m_s = 0$.
انتگرال θ (یا μ) می‌تواند با استفاده‌از یک اتحاد برای توابع وابسته لوژاندر، یعنی،

$$\mu P_{lm_l} = \left[\frac{l - m_l + 1}{2l + 1}\right] P_{l+1, m_l} + \left[\frac{l + m_l}{2l + 1}\right] P_{l-1, m_l}$$

محاسبه شود . با بردن در (۷–۸۱) و با استفاده از تعامد توابع وابسته لوژاندر، نتیجه می‌گیریم

$$z_{ij} \propto \delta_{m_lm_l'} \delta_{m_sm_s'} [\delta_{l, l'+1} + \delta_{l, l'-1}]$$

z_{ij} به‌جز برای $\Delta l = \pm 1$ صفر است . ممکن است محدودیتهای دیگری ناشی ازانتگرال شعاعی وجود داشته باشد اما این محدودیتها بسته به‌مسئله نیروی مرکزی موردنظر تغییر می‌کنند .

اثبات‌اینکه‌عنصرهای x_{ij} و y_{ij} منجربه‌قواعدگزینش $\Delta l = \pm 1$، $\Delta m_l = \pm 1$ و $\Delta m_s = 0$ می‌شوند به‌عنوان تمرین واگذار می‌شود . به‌طور خلاصه ، می‌بینیم که در تقریب دو قطبی الکتریکی ، سیستمهایی که به‌وسیله حالتهای $|nlm_lm_s\rangle$ مشخص می‌شوند متحمل گذارهای تابشی‌ای می‌شوند که در آنها قواعد گزینش $\Delta l = \pm 1$، $\Delta m_l = 0, \pm 1$ و $\Delta m_s = 0$ برقرار است. تمام گذارهای دیگر در مرتبه اول ممنوع هستند . هم‌چنین می‌توان‌قواعدگزینش $\Delta l = \pm 1$ ، $\Delta j = 0, \pm 1$ و $\Delta m_j = 0, \pm 1$ را برای طرحوارهٔ $|nljm_j\rangle$ اثبات کرد . آهنگ (۸–۷۰) به‌شرطی معتبر است که هم طول موج تابش بزرگ باشد (تقریب دوقطبی) و هم شدت تابش کم باشد (پریشیدگی مرتبه اول) .

اکنون ، با استفاده از یک استدلال آماری ، نشان خواهیم داد که (۷–۸۰) در واقع ناکامل است . در واقع همین استدلال جملات از قلم افتاده در فرایندگذار را ایجادمی‌کند.

استدلال به‌صورت زیر است :

مجموعه‌ای از سیستمهای کوانتومی ، مثلا" اتمها ، در نظر بگیریم که هرکدام از آنها می‌توانند فقط در یکی از دوحالت $|\varepsilon_i\rangle$ یا $|\varepsilon_j\rangle$ با $\varepsilon_i > \varepsilon_j$ قرار گیرند . فرض کنیم که اتمها و تابشهای با فرکانس تشدید $\omega = \omega_{ij}$ در یک جعبه قرار داشته باشند . به‌علاوه ، فرض کنیم که در آغاز تعداد اتمهای موجود در هردوحالت باهم برابرند ، یعنی ، $N_i = N_j$. از اصل بزگشت‌پذیری میکروسکوپیکی ، نتیجه می‌گیریم

$$\frac{dN_{i\to j}}{dt} = \frac{dN_{j\to i}}{dt}$$

بنابراین ترازها هم جمعیت باقی می‌مانند . چون در مجموع هیچ انرژی توسط اتمها جذب یا گسیل نمی‌شود ،حالت تابش بدون تغییر باقی می‌ماند . متاسفانه ، این نتایج با مشاهدات تجربی ناسازگاراند . در فصل ۱ دیدیم که توزیع فرکانس تابش در یک کاواک به‌سمت چگالی طیفی جسم سیاه‌که‌فقط‌به‌وسیله‌دمای دیواره‌های محفظه ، و نه به‌وسیله ترکیب محفظه یا ثابتهای آن ، تعیین می‌شود میل می‌کند .

هم‌چنین می‌توان تحقیق کرد که اتمهای داخل جعبه به‌یک توزیع تعادل می‌رسندکه با قانون بولتزمن سازگار است . نسبت جمعیتهای ترازها باید به‌سمت

$$\frac{N_j}{N_i} = \frac{e^{-\varepsilon_j/kT}}{e^{-\varepsilon_i/kT}} \qquad (۸۲-۷)$$

میل کند . چون ترازهای با انرژی پائین‌تر میل دارند که پرجمعیت‌تر شوند ، باید فرایندی وجود داشته باشد که گذارهای از انرژی بالاتر به‌انرژی پائین‌تر را تسهیل نماید . به‌علاوه چون باید ، صرفنظر از حالت اولیه تابش ، به‌توزیعی نظیر توزیع موجود در (۷–۸۲) برسیم نتیجه می‌گیریم که‌این فرایند باید مستقل‌از $\rho_{rad}(\omega)$ باشد و می‌تواند فقط تابع سیستم اتمی باشد . لذا گذارهای تابشی باید به‌طور خودبه‌خود از حالتهای با انرژی بالاتر به‌حالتهای با انرژی پائین‌تر ، حتی در غیاب تابش ، صورت گیرند . اگر از یک حالت معینی گذارنتواند به‌طور خودبه‌خود صورت گیرد ، آن حالت باید حالت پایه یا حالت با پائین‌ترین انرژی باشد . *توضیح منشاء این گسیلهای خودبه‌خود و محاسبه آهنگ آن نمی‌توانند تنها با استفاده از مکانیک کوانتومی ماده انجام گیرند .*

با این وجود ، دو روش وجود دارد که عموما" برای به‌دست‌آوردن این "آهنگ" به‌کار برده می‌شوند . یکی‌ازآنها که دقیق‌تر است متکی به‌این واقعیت است که یک پریشیدگی‌تابشی

وابسته به‌زمان دارای هویت مخصوص به‌خود است و تابع قوانین نظریه‌کوانتومی است .کوانتش این میدان تابشی مستقیما" به‌مفهوم کوانتای نور یا فوتون منجر می‌شود . علاوه بر این ،یک چنین‌کوانتشی به‌طورکاملا" طبیعی منجر به‌آهنگهای خودبه‌خودی و هم‌چنین آهنگهای‌القائی می‌شود . بنابراین‌کل سیستم تشکیل می‌شود از ماده به‌اضافه تابش که انرژی بین‌آنها به‌صورت فوتون مبادله می‌شود . بحث مشروح‌تر این روش را به‌فصل ۱۲ موکول می‌کنیم .

برای مقصود فعلی ما می‌توان آهنگ خودبه‌خودی را با استفاده از روش آماری به‌دست آورد .در حالی‌که این روش فاقد دقت به‌نظرمی‌آید ،با این وجود معتبراست و منجر به‌همان نتایجی می‌شود که از روش بحث شده در بالا به‌دست می‌آید .

۱۵ ــ دیدگاه اینشتین در گسیل خودبه‌خود ــ توازن دقیق

برای تعقیب دیدگاه‌اینشتین، مناسب است که آهنگ القائی (جذب و گسیل) در (۷ــ۸۰) را به‌صورت

$$R_{ij}^{(\mathrm{ind})} = B_{ij}\,\rho_{\mathrm{rad}}(\omega_{ij})$$

بنویسیم که در آن

$$B_{ij} = \frac{4\pi^2}{3}\frac{e^2}{\hbar^2}\left|\langle\varepsilon_i|\mathbf{r}|\varepsilon_j\rangle\right|^2 \qquad (۸۳-۷)$$

ضریب " B " ی اینشتین نامیده می‌شود . به‌طور مشابه آهنگ خودبه‌خودی برای گذار از $|\varepsilon_j\rangle$ به $|\varepsilon_i\rangle$ را به‌صورت

$$R_{ij}^{(\mathrm{spont})} = A_{ij} \qquad (\varepsilon_j > \varepsilon_i) \qquad (۸۴-۷)$$

وارد می‌کنیم که در آن A_{ij} ضریب " A " نامیده می‌شود . تعداد اتمهائی که (در واحد زمان) از $|\varepsilon_j\rangle$ به $|\varepsilon_i\rangle$ ،با $\varepsilon_j > \varepsilon_i$ ، عبور می‌کنند عبارت است از

$$\begin{aligned}\frac{dN_{j\to i}}{dt} &= N_j[R_{ij}^{(\mathrm{ind})} + R_{ij}^{(\mathrm{spont})}]\\ &= N_j[B_{ij}\,\rho_{\mathrm{rad}}(\omega_{ji}) + A_{ij}]\end{aligned} \qquad (۸۵-۷)$$

هم‌چنین ، تعدادی که از انرژی پائین‌تر به‌بالاتر می‌روند ($\varepsilon_j > \varepsilon_i$) عبارت است‌از

$$\frac{dN_{i\to j}}{dt} = N_i R_{ij}^{(\mathrm{ind})} = N_i B_{ij}\rho_{\mathrm{rad}}(\omega_{ji}) \qquad (۸۶-۷)$$

وقتی تعادل حرارتی بر قرار شود ، داریم

$$\frac{dN_{i\to j}}{dt} = \frac{dN_{j\to i}}{dt}$$

یا

$$N_j[B_{ij}\rho_{\mathrm{rad}}(\omega_{ji}) + A_{ij}] = N_i B_{ij}\rho_{\mathrm{rad}}(\omega_{ji}) \qquad (۸۷-۷)$$

به‌علاوه ، در حالت تعادل نسبت جمعیتها با قانون بولتزمن داده می‌شود

$$\frac{N_j}{N_i} = \frac{e^{-\varepsilon_j/kT}}{e^{-\varepsilon_i/kT}} = e^{-\hbar\omega_{ji}/kT} \qquad \left(\omega_{ji} = \frac{\varepsilon_j - \varepsilon_i}{\hbar}\right) \qquad (۸۸-۷)$$

با ترکیب (۷–۸۷) و (۷–۸۸) و حل آن برای ρ_{rad} ، خواهیم داشت

$$\rho_{\mathrm{rad}}(\omega_{ji}) = \frac{A_{ij}}{B_{ij}}\frac{1}{e^{\hbar\omega_{ji}/kT} - 1} \qquad (۸۹-۷)$$

بالاخره ، انتظار داریم که چگالی طیفی تعادل با قانون پلانک

$$\rho(\omega, T) = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3}\frac{\omega^3}{e^{+\hbar\omega/kT} - 1} \qquad (۹۰-۷)$$

مطابقت داشته باشد . از مقایسه (۷–۸۹) و (۷–۹۰) مشاهده می‌شود که

$$\frac{A_{ij}}{B_{ij}} = \frac{\hbar\omega_{ij}^3}{\pi^2 c^3}$$

در نتیجه

$$A_{ij} = \frac{\hbar\omega_{ji}^3}{\pi^2 c^3} B_{ij} \qquad (۹۱-۷)$$

توجه کنیم که توازن دقیق آماری منجر به‌رابطه‌ای بین ضرایب A و B می‌شود ، اما اطلاعاتی در مورد ساختار فردی آنها نمی‌دهد . چون B_{ij} قبلا" در (۷–۸۳) به‌دست آمده‌است،آهنگ

خودبه‌خودی به‌صورت زیر به‌دست می‌آید

$$R_{ij}^{(\text{spont})} = A_{ij} = \frac{\hbar\omega_{ji}^3}{\pi^2 c^3}\frac{4\pi^2}{3}\frac{e^2}{\hbar^2}\left|\langle\varepsilon_i|\mathbf{r}|\varepsilon_j\rangle\right|^2$$
$$= \frac{4\omega_{ji}^3 e^2}{3\hbar c^3}\left|\langle\varepsilon_i|\mathbf{r}|\varepsilon_j\rangle\right|^2$$

به‌طور خلاصه ، مشاهده می‌کنیم که وقتی‌نظریه پریشیدگی به‌یک پریشیدگی هماهنگ اعمال شود ،منجر به‌آهنگهای‌گذار ناکامل می‌شود . علت این مطلب این است که‌فرض‌کرده‌ایم می‌توان‌بستگی زمانی پریشیدگی درمجاورت یک سیستم‌کوانتومی را "کنترل" کرد . درمکانیک کلاسیکی ، به‌ندرت وجود چنین قیدهای وابسته به‌زمانی موردسئوال قرار می‌گیرد . در نظریه کوانتومی ،خود پریشیدگی درمعرض محدودیتهایی‌است که به‌وسیله‌اصل عدم قطعیت‌تحمیل می‌شوند .در حالی‌که استدلالهای‌آماری می‌توانند برای به‌دست‌آوردن‌آهنگهای خودبه‌خودی به‌کار روند ، یک روش دقیق‌تر مستلزم کوانتش میدان پریشنده است .

۱۶ ــ روش و ردشی (رالی ــ ریتس)

در روشهای تقریبی بحث شده در بالا لازم است که ثابت پریشیدگی λ کوچک‌باشد . به‌علاوه ، وقتی $\lambda \to 0$ جملات مرتبه اول برای نزدیک‌شدن به‌انرژیها و هم‌چنین ویژه‌حالتها، کافی هستند .

اکنون یک روش تقریبی درنظرخواهیم گرفت‌که مستقل ازمقدار λ است و حتی‌درموردی که پریشیدگی بزرگ باشد اعمال می‌شود . اما ، تعیین دقت این روش مشکل است . به‌علاوه ، این روش معمولا" برای ارزشیابی ویژه مقدارها مفیدتر است تا برای ویژه تابعها .

روش و ردشی بخصوص در تعیین انرژی حالت پایه هامیلتونی وقتی این تراز جزء یک طیف گسسته باشد مفید است . در این روش نیاز به لم زیر خواهیم داشت .

لم ــ فرض کنیم $|\alpha\rangle$ یک‌کت بهنجارشده و ε_1 انرژی‌حالت پایه $\mathscr{H}$ باشد .دراین‌صورت نامساوی زیر همیشه برقرار است

$$\langle\alpha|\mathscr{H}|\alpha\rangle \geqslant \varepsilon_1 \qquad (۹۲-۷)$$

اثبات ــ با بسط $|\alpha\rangle$ در ویژه پایه راست هنجار $\mathscr{H}$ ، یعنی، $|\alpha\rangle = \sum_i a_i|\varepsilon_i\rangle$ طرف چپ (۷ــ۹۲) خواهد شد

$$\left\{\sum_i^\infty \langle\varepsilon_i|a_i^*\right\}\mathscr{H}\left\{\sum_j^\infty a_j|\varepsilon_j\rangle\right\} = \sum_{ij}^\infty a_i^* a_j \varepsilon_j \langle\varepsilon_i|\varepsilon_j\rangle$$
$$= \sum_{ij}^\infty a_i^* a_j \varepsilon_j \delta_{ij} = \sum_{i=1}^\infty \varepsilon_i |a_i|^2$$

چون ε_1 انرژی حالت پایه است ، داریم $\varepsilon_1 \leqslant \varepsilon_i$ و

$$\langle\alpha|\mathscr{H}|\alpha\rangle = \sum_{i=1}^\infty \varepsilon_i |a_i|^2 \geqslant \varepsilon_1 \sum_{i=1}^\infty |a_i|^2$$

کت $|\alpha\rangle$ بهنجارشده فرض می‌شود ، بنابراین جمع طرف راست برابر با یک است و لم اثبات شده است .

در مکانیک موجی ، این نامساوی به‌شکل

$$I = \int \psi_\alpha^* \mathscr{H} \psi_\alpha \, d\mathbf{r} \geqslant \varepsilon_1 \qquad (۹۳-۷)$$

در می‌آید که در آن

$$\int \psi_\alpha^* \psi_\alpha \, d\mathbf{r} = 1$$

توجه کنیم که انتگرال طرف چپ بیانگر حد بالای انرژی دقیق حالت پایه $\mathscr{H}$ ، بدون توجه به ψ_α است .

روش و ردشی‌را باانتخاب‌یک تابع‌آزمایشی "معقول "که‌وابسته به N پارامتر ξ_1 ، . . . ، ξ_N می‌باشد ، یعنی ،

$$\psi_{\text{trial}} = \psi_{\text{trial}}(\mathbf{r}, \xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_N)$$

به‌کار خواهیم برد . با بردن شکل فرضی ψ در (۹۳-۷) ، عنصر ماتریس $\langle\alpha|\mathscr{H}|\alpha\rangle$ خواهد شد .

$$\int \psi_{\text{trial}}^* \mathscr{H} \psi_{\text{trial}} \, d\mathbf{r} = I(\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_N) \qquad (۹۴-۷)$$

از لم فوق نتیجه می‌شود که ، بدون توجه به‌مقادیر عددی ξ ها ، $I \geqslant \varepsilon_1$.بنابراین‌می‌توان با کمینه‌کردن I کمترین حد *بالائی*برای انرژی دقیق حالت پایه ، ε_1 ، به‌دست آورد . این امر با پیداکردن جواب N معادله

$$\left.\frac{\partial I}{\partial \xi}\right|_{\xi_i=\xi_{i_0}} = 0 \qquad (i = 1, \ldots, N)$$

حاصل می‌شود . انرژی وردشی خواهد شد

$$\varepsilon_{var} = I_{min}(\xi_{1_0}, \xi_{2_0}, \ldots, \xi_{N_0}) \geqslant \varepsilon_1 \qquad (۹۵ - ۷)$$

روش مزبوررا با توابع آزمایشی متفاوتی تکرارمی‌کنیم .کمترین انرژی وردشی نگاه داشته می‌شود و معرف بهترین تقریب برای ε_1 است . در عمل ، با توابع آزمایشی‌ای‌که پارامترهای بسیاری داشته باشند نتایج بهتری به‌دست می‌آید ، زیرا ψ انعطاف بیشتری نسبت به‌تغییرات خواهد داشت .

اگر تابع آزمایشی طوری باشد که بتواند با تغییر پارامترها کاملا" بر تابع دقیق حالت پایه منطبق شود ،کمینهٔ مقدار انتگرال وردشی با انرژی دقیق حالت پایه متناظر خواهدبود. در واقع ، اگر $\psi_{trial} = \psi_1$ باشد ، داریم

$$\langle \varepsilon_1 | \mathscr{H} | \varepsilon_1 \rangle = \int \psi_1^* \mathscr{H} \psi_1 \, d\mathbf{r} = \varepsilon_1 \qquad (۹۶ - ۷)$$

تغییرشکل تابع آزمایشی برای رسیدن به‌مقدار کمتری از I_{min} و در نتیجه نزدیک‌تر به‌مقدار ε_1 ممکن است منجر به‌تقریب ضعیفتری برای ψ_1 گردد . چون ψ_1 معمولا" شناخته شده نیست ، تعیین دقت $\psi_{var}(\mathbf{r}, \xi_{1_0}, \ldots, \xi_{N_0})$ مشکل است .

روش فوق را در محاسبه‌ای که شامل حالت پایه هیدرژن است روشن خواهیم‌کرد* . البته ، در این مورد می‌دانیم که جواب دقیق به‌صورت

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{a^{3/2}} e^{-r/a} \qquad \varepsilon_1 = -e^2/2a \qquad (a = \hbar^2/me^2) \qquad (۹۷ - ۷)$$

است . بنابراین ارزیابی‌دقت روش‌وردشی برای توابع آزمایشی متعددی‌امکان‌پذیر خواهد بود .

اگر یک تابع آزمایشی بهنجارشده به‌شکل

---

* به‌عنوان مثال به‌کتاب زیر مراجعه کنید

A. Messiah, " Quantum Mechanics", Volume II P.767. wiley, New York , 1962.

$$\psi_{\text{trial}}(r, \xi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{\xi}{a}\right)^{3/2} e^{-\xi r/a} \qquad (۹۸-۷)$$

به‌کار بریم ، انتگرال وردشی به‌شکل

$$I(\xi) = \int \psi^*_{\text{trial}} \left\{\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{r}\right\} \psi_{\text{trial}}\, d\mathbf{r} = \frac{-e^2}{2a} (\xi^2 - 2\xi) \qquad (۹۹-۷)$$

در خواهد آمد . این انتگرال وقتی کمینه است که

$$\left.\frac{\partial I}{\partial \xi}\right|_{\xi=\xi_0} = \frac{-e^2}{2a} (2\xi_0 - 2) = 0 \qquad \text{یا} \qquad \xi_0 = 1$$

انرژی وردشی عبات است از

$$I_{\min} = \frac{-e^2}{2a} = \varepsilon_1$$

که با (۷–۹۷) یکسان است . اینجا موردی است که تابع آزمایشی با ویژه تابع دقیق سازگار است . روش وردشی ، وقتی $\xi_0 = 1$ باشد ، منجر به‌یک مقدار کمینه برای انرژی می‌شود . این تابع وردشی و انرژی وردشی نمایشگر جواب دقیق هستند .

اگر یک تابع آزمایشی بهنجارشده (با یک پارامتر) به‌شکل

$$\psi_{\text{trial}}(r, \xi) = \left(\frac{\xi^5}{3\pi a^5}\right)^{1/2} r\, e^{-\xi r/a} \qquad (۱۰۰-۷)$$

انتخاب کرده بودیم ، انتگرال وردشی مشابه (۷–۹۹) می‌شد

$$I_{\text{var}}(\xi) = \frac{-e^2}{2a} \left(\xi - \frac{\xi^2}{3}\right)$$

مقدار کمینه در $\xi_0 = \frac{3}{2}$ رخ می‌دهد که در آن I مقدار

$$\varepsilon_{\text{var}} = I_{\min} = \frac{-e^2}{2a} \left(\frac{3}{2} - \frac{1}{3}\left(\frac{3}{2}\right)^2\right) = \frac{-3}{4} \frac{e^2}{2a} = 0.75\varepsilon_1 \qquad (۱۰۱-۷)$$

را می‌گیرد و ۲۵ درصد خطا ایجاد می‌کند . چون ε_1 منفی است ، نتیجه می‌گیریم $\varepsilon_{\text{var}} > \varepsilon_1$ ،

همان‌چیزی که لم فوق ایجاب می‌کند . تابع وردشی در (۷ــ۱۰۰) خواهد شد

$$\psi_{\text{var}}(r, \zeta) = \left[\frac{(\frac{3}{2})^5}{3\pi a^5}\right]^{1/2} re^{-3r/2a}$$

بالاخره ، تابع آزمایشی

$$\psi_{\text{trial}}(r, \zeta) = \frac{1}{\pi a^{3/2}} \sqrt{\xi} \frac{1}{[\xi^2 + (r/a)^2]} \qquad (۱۰۲ - ۷)$$

را در نظر می‌گیریم . انتگرال وردشی در این مورد می‌دهد

$$I_{\text{var}}(\xi) = \frac{-e^2}{2a}\left[\frac{8\xi - \pi}{2\pi\xi^2}\right] \qquad (۱۰۳ - ۷)$$

مشتق‌گیری نشان می‌دهد که $\xi_0 = \pi/4$ و

$$I_{\text{min}} = \frac{8\varepsilon_1}{\pi^2} \simeq 0.8\varepsilon_1 \qquad (۱۰۴ - ۷)$$

این بالغ بر ۲۰ درصد خطا می‌شود . جالب است‌که تابع آزمایشی به‌ظاهر ضعیفتر (۷ــ۱۰۲) عملا" منجر به‌انرژی کمتر و در نتیجه درست‌تر از تابع موجود در (۷ــ۱۰۰) می‌شود .

روش وردشی بخصوص وقتی که انرژیهـای دقیق حالت پایه مورد نیازاند مفید است . ارزیابی دقت تابع آزمایشی متناظر مشکل است و اعتبار آن باید به‌درستی مورد سئوال قرار گیرد . روش فوق با قدری اصلاح می‌تواند به‌حالتهای برانگیخته نیز اعمال شود ، اما مـا در اینجا این کار را نخواهیم کرد . در بحثهایی که از اتمهای چندالکترونی خـواهیم داشـت (فصل ۱۰) فرصت خواهیم یافت که روش وردشی را به‌کار بریم .

زمان و فضا اجازه‌توصیف تمام‌روشهای تقریبی را به‌ما نمی‌دهد . در بین آنهاروشهایی عددی وجود دارندکه درعصرکامپیوتر بیشترروا‌ج یافته‌اند .یک روش تحلیلی‌مهم‌که‌در بحث ما فراموش شده است‌تقریب "انتگرال فاز" یا تقریب و نتزل ــ کرامرزــ بریلوئن(WKB)است. بحث مختصر این روش در پیوست (الف) آورده شده است .

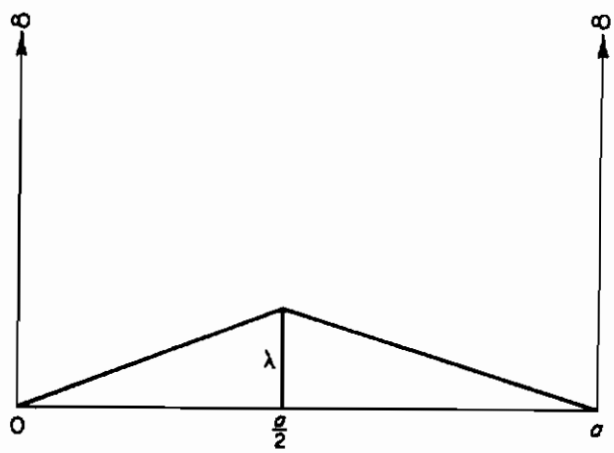
مسائل

۷ــ۱ انرژی حالت پایه‌را ، تا تقریب مرتبه اول ، برای ذره‌ای واقع در یک چاه یک بعدی پریشیده (شکل ۷ــ۶) زیر پیدا کنید

$$V = \frac{2\lambda}{a}x \quad ، \quad 0 \leqslant x \leqslant \tfrac{1}{2}a \qquad \text{برای}$$

$$V = 2\lambda\left(1 - \frac{x}{a}\right) \quad ، \quad \tfrac{1}{2}a < x \leqslant a \qquad \text{برای}$$

$$V = \infty \qquad \text{جاهای دیگر}$$



شکل (۷ــ۶)

۷ــ۲ (الف) ویژه مقدارهای تقریبی انرژی (تا تقریب مرتبه دوم) ذره‌ای‌را که در پتانسیل $V = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 + \lambda x$ قرار دارد پیدا کنید .

(ب) این مسئله را با تکمیل‌کردن‌مربع در پتانسیل و تغییر متغیر مستقل ، به‌طور دقیق حل کنید . نتیجه را با نتیجه فوق مقایسه کنید .

۷ــ۳ انرژی تقریبی حالت پایه یک ذره در پتانسیل $V = \frac{1}{2}m\omega x^2 + \lambda x^3$ را پیدا کنید .

۷ــ۴ روابط (۷ــ۲۴)و (۷ــ۲۵) را برای به‌دست‌آوردن فرمولی برای تصحیحات مرتبه‌سوم ویژه مقدارهای انرژی به‌کار برید .

۷ــ۵ (الف) نشان دهید که گشتاور دوقطبی الکتریکی هیدرژن در حالت پایه ناپریشیده $|100\rangle$ صفر است .

(ب) نشان دهید که گشتاور دوقطبی وابسته به‌حالتهای برانگیخته اول $|2^{\pm}\rangle$

[که به‌وسیله (۷ـ۴۵) داده شده‌اند] ،عبارت است از $p = \mp 3ea$ و درامتداد محور z قرار دارد . آیا این گشتاور دائمی است یا القائی؟ توضیح دهید .

۷ـ۶ معادله‌ای برای پیداکردن جابه‌جایی اثر استارک در چند تراز اول هیدرژن برای یک میدان ضعیف $\mathbf{E}$ بسازید (راهنمائی: جملات ساختار ریز را به‌عنوان پریشیدگی غالب، همان‌طور که در اثر غیرعادی زیمن انجام شد ، به‌کار برید .سپس ، فرض کنید که ψ_{nljm_j} یک مجموعه ناپریشیده با انرژی ناپریشیده‌ای که‌فقط تابع n و j است باشد . بالاخره ماتریس پریشیدگی وابسته به‌میدان $\mathbf{E}$ نسبت به‌حالتهای با l و m_j متفاوت را بسازید و قطری کنید .)

۷ـ۷ (الف) یک ذره بدون اسپین را در یک چاه مربعی دوبعدی

$$V = 0 \qquad (0 \leqslant x, y \leqslant a)$$
$$V = \infty \qquad (\text{جاهای دیگر})$$

در نظر بگیرید . انرژیها و ویژه تابعهای حالتهای پایه و برانگیخته‌ای را که‌درتفکیک متغیرها در مختصات دکارتی ظاهر می‌شوند به‌دست آورید .

(ب) سپس فرض کنید که یک پریشیدگی به‌شکل

$$V = \lambda xy \qquad ، \qquad 0 \leqslant x, y \leqslant a \quad \text{برای}$$

اضافه می‌شود .ویژه‌تابعهای ناپریشیده و جابه‌جاییهای مرتبه اول انرژی‌را برای حالت پایه و حالتهای برانگیخته اول پیدا کنید .

۷ـ۸ رابطه $[\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}, \hat{J}_z] = 0$ را تحقیق کنید .

۷ـ۹ با استفاده از نتایج (۶ـ۲۴) ،مستقیما" نشان دهید که (۷ـ۵۶) درست است .

۷ـ۱۰ با انتگرال‌گیری وساده‌کردن نشان‌دهیدکه (۷ـ۶۸)از معادله پیشین به‌دست‌می‌آید .

۷ـ۱۱ در روی یک دیاگرام تراز (شامل آثار ساختار ریز) برای هیدرژن ، چند گذارمجازاول را در تقریب دوقطبی الکتریکی نشان دهید .

۷ـ۱۲ (الف) ثابت بهنجارش را برای تابع آزمایشی

$$\psi(\xi, r) = Ne^{-\xi(r/a)^2} \qquad (a = \hbar^2/me^2)$$

که در آن ξ یک پارامتر وردشی است ، پیدا کنید .

(ب) این تابع را برای پیداکردن حد بالای انرژی حالت پایه هیدرژن به‌کاربرید .

(ج) نتیجه مقایسه این انرژی با مقدار دقیق آن چیست ؟ (توجه کنید که‌این تابع

آزمایشی اصولا" ویژه تابع حالت پایه نوسانگر هماهنگ است .)

۷–۱۳ نشان دهید که عناصر ماتریسی $\langle nlm_l m_s|\hat{x}|nl'm_l'm_s\rangle$ و $\langle nlm_l m_s|\hat{y}|nl'm_l'm_s'\rangle$ تنها درصورتی غیرصفرند که داشته باشیم $\Delta l = l - l' = \pm 1$ ، $\Delta m_l = m_l - m_l' = \pm 1$ و $\Delta m_s = m_s' - m_s' = 0$.

۷–۱۴ یک الکترون هیدرژنی (با صرفنظرکردن از اسپین) را دریک میدان الکتریکی یکنواخت در امتداد محور z در نظر بگیرید .

(الف) بااستفاده از (۷–۴۱) ، معادله ویژه مقداری انرژی را برای الکترون درمختصات قطبی کروی بنویسید . قرار دهید $\lambda = eE$.

(ب) تحقیق کنید که تابع

$$\psi = \left(\frac{1}{\pi a^3}\right)^{1/2} e^{-r/a}\left[1 - \frac{\lambda \cos\theta}{e^2}\left(ar + \frac{r^2}{2}\right)\right]$$

(که در آن $a = \hbar^2/me^2$ است) معرف تقریب مرتبه اول ویژه تابع حالت پایه اتم هیدرژن است . این کار را مستقیما" با قراردادن نتیجه در معادله به‌دست آمده در بخش (الف) انجام دهید . ویژه مقدار درست تا مرتبه اول را پیدا کنید (راهنمائی : از جملات λ^2 و بالاتر صرفنظر کنید)

(ج) با استفاده از (۷–۲۵) ، نشان دهید که تصحیح مرتبه دوم انرژی عبارت است از

$$\lambda^2\varepsilon^{(2)} = -\frac{9}{4}a^3E^2$$

(د) انرژی وابسته به‌یک گشتاور دوقطبی الکتریکی القائی یک سیستم به‌صورت

$$\varepsilon = -\frac{1}{2}\alpha E^2$$

بیان شود می‌شود که در آن α قطبش‌پذیری سیستم نامیده می‌شود . نشان دهید که قطبش‌پذیری اتم هیدرژن در حالت پایه‌اش عبارت است از

$$\alpha = \frac{9}{2}a^3$$

مراجع پیشنهادی

Bethe, H. A., and Salpeter, E., "Quantum Mechanics of One and Two Electron Atoms." Springer-Verlag, Berlin, 1957.
Bohm, D., "Quantum Theory." Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1951.
Borowitz, S., "Fundamentals of Quantum Mechanics," Benjamin, New York, 1967.
Eisberg, R. M., "Fundamentals of Modern Physics." Wiley, New York, 1961.
Merzbacher, E., "Quantum Mechanics." 2nd ed. Wiley, New York, 1970.
Messiah, A. "Quantum Mechanics," Volume II. Wiley, New York, 1962.
Saxon, D., "Elementary Quantum Mechanics." Holden-Day, San Francisco, 1964.

۸

نظریه پراکندگی

در تمام طول گسترش فیزیک جدید ، فیزیکدانها به‌دنبال درک برهم‌کنشهای اساسی طبیعت بودند . بیشتر دانش ما از این برهم‌کنشها را آزمایشهای پراکندگی فراهم ساخته‌اند. در این فصل ، مکانیک کوانتومی فرایند پراکندگی را مورد بررسی قرار خواهیم داد . مطلب را با یادآوری مختصر نظریه کلاسیکی پراکندگی شروع می‌کنیم .

۱ ــ نظریه کلاسیکی پراکندگی

یک آزمایش نمونه‌ای پراکندگی مشاهده مسیرهای اولیه و نهائی ذراتی است که تحت تأثیر یک نیرو ــ غالبا" یک نیروی مرکزی ــ حرکت می‌کنند . در فیزیک اتمی و هسته‌ای یک باریکه از ذرات روی یک مرکز نیرو می‌تابد و سپس پراکنده می‌شود . هر ذره باریکه تحت زاویه‌ای‌که بستگی به‌انرژی و تکانه اولیه‌آن و هم‌چنین طبیعت مرکزنیرو دارد منحرف می‌شود . ما بحث خود را به‌مسائلی محدود می‌کنیم که در آنها انرژی ذره در فرایند پراکندگی پایسته می‌ماند (پراکندگی کشسان) .

پتانسیل نیروی‌مرکزی به‌شکل $V(\mathbf{r}) = V(r)$ است ، در نتیجه مناسب است که‌از مختصات قطبی کروی ، که مرکز نیرو در مبداء آن است استفاده کنیم و جهت فرود را منطبق بر جهت $\theta = 0$ ، معمولا" جهت محور z ، انتخاب کنیم . جهت پراکندگی به‌وسیله زوایای قطبی‌وسمتی θ و ϕ مشخص می‌شود . باریکه فرودی به‌وسیله انرژی ε وچگالی شار یا شدت $\mathbf{J}$ ی آن مشخص می‌شود . تعداد ذرات پراکنده شده (در واحد زمان) در داخل زاویه حجمی $d\Omega$ در اطراف زوایای θ و ϕ هم با J و هم با $d\Omega$ متناسب است ، و می‌توان نوشت $dN \propto J\, d\Omega$.

ثابت تناسب تابعی است از θ و ϕ و موسوم است به‌مقطع موثر دیفرانسیلی ، یعنی ،

$$dN = \sigma(\theta, \phi) J \, d\Omega$$

یا

$$\sigma(\theta, \phi) = \frac{1}{J}\frac{dN}{d\Omega} \qquad (۱-۸)$$

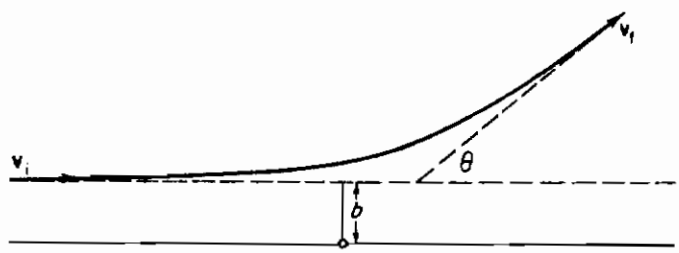
برای نیروی مرکزی پراکننده ، تقارن ایجاب می‌کند که مقطع موثر مستقل از زاویه‌سمتی باشد . بنابراین پراکندگی نسبت به‌جهت تابش (محور z) متقارن است .

مناسب است که تعداد کل ذرات پراکنده شده (در واحد زمان) را محاسبه کنیم .این کار با انتگرال‌گیری (۸–۱) روی یک زاویه حجمی کامل انجام می‌گیرد

$$N = J \int_{4\pi} \sigma(\theta, \phi) \, d\Omega = J\sigma_{\mathrm{T}} \qquad (۲-۸)$$

انتگرال فوق **مقطع موثر کل** را ، که عبارت از مساحت موثر پراکننده است که به‌وسیلهٔ باریکه دیده می‌شود ، به‌دست می‌دهد .

در آنچه در زیر می‌آید بحث خودرا به‌پراکننده‌های با نیروی مرکزی محدود می‌کنیم . برای محاسبه مقطع موثر $\sigma(\theta)$ ،باید نخست زاویه پراکندگی‌را برای هرذره باریکه‌بدانیم .مسیر یک ذره در شکل (۸–۱) رسم شده است .



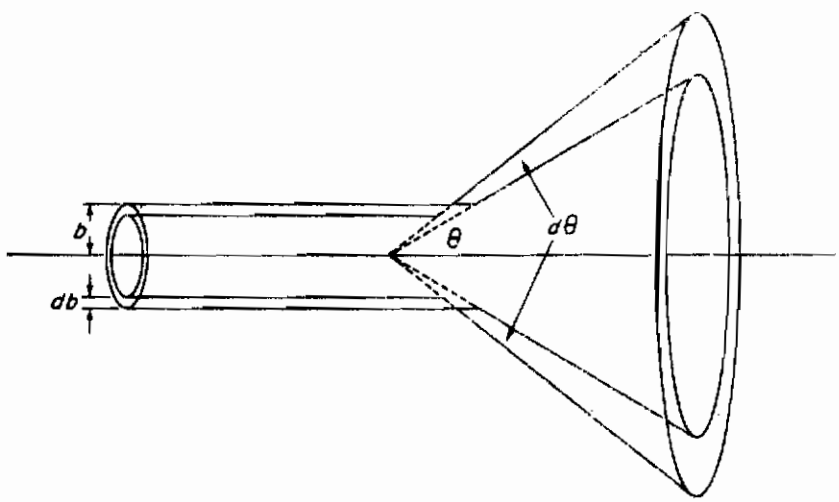
شکل (۸–۱)یک مسیر پراکندگی نمونه‌ای که سرعتهای اولیه و نهایی ، پارامتر برخورد و زاویه پراکندگی را نشان می‌دهد .

برای یک‌انرژی معین ،زاویهٔ پراکندگی به‌پارامتر بر خورد b بستگی دارد .این پارامتر با فاصله عمودی مرکز نیرو از امتداد سرعت اولیه v_i (شکل۸–۱)تعریف شده است . معادله $b = b(\theta)$ ، که پارامتر برخورد را به‌زاویه پراکندگی ربط می‌دهد ، باید قبل از اینکه هرگونه پیشگویی در باره مقطع موثر بتواند صورت گیرد از مسیر ذره محاسبه شود . در بیشتر مسائل

پراکندگی ، زاویه پراکندگی با افزایش b به‌سرعت کاهش می‌یابد .

تعداد ذرات پراکنده‌شده در داخل یک زاویه حجمی بین θ و $\theta + d\theta$ باید با تعداد ذراتی که در باریکه فرودی در حلقه‌ای به‌شعاع b و ضخامت db حول محور z قرار دارند برابر باشد (شکل ۸ــ۲) . این تعداد عبارت است از

$$dN = J\,dA = J2\pi b\,db = J2\pi b\,\frac{db}{d\Omega}\,d\Omega$$



شکل (۸ــ۲) پراکندگی ذرات از یک حلقه دیفرانسیلی در داخل یک زاویه حجمی دیفرانسیلی

با استفاده از (۸ــ۱) ، مقطع موثر به‌صورت

$$\sigma(\theta) = 2\pi b\,\frac{db}{d\Omega}$$

در می‌آید . این عبارت ، با استفاده از*

$$d\Omega = 2\pi \sin\theta\,d\theta$$

به‌صورت

$$\sigma(\theta) = \frac{-b(\theta)}{\sin\theta}\,\frac{db(\theta)}{d\theta} \qquad (۸-۳)$$

---

* چون b با کاهش θ افزایش می‌یابد ، $db/d\theta$ منفی است ، از این‌رو یک علامت منفی در (۸ــ۳) وارد کرده‌ایم تا مقطع موثر مثبت بماند .

در می‌آید . وقتی $b = b(\theta)$ معلوم شد ، مقطع موثر می‌تواند مستقیما" محاسبه شود .

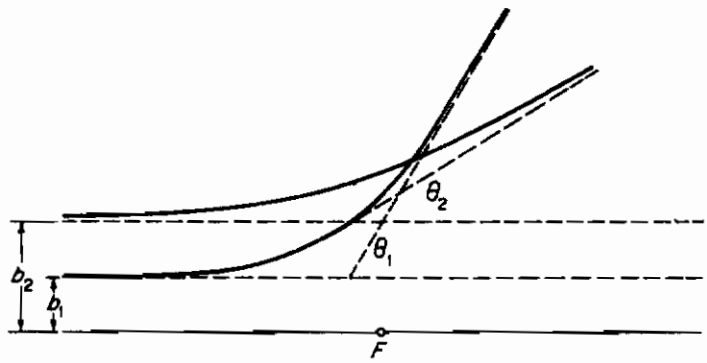
این روش را با به‌کاربردن آن در مورد نیروی دافعه کولنی (پراکندگی راترفورد)روشن می‌کنیم . فرض می‌کنیم که پرتا به و هدف به‌ترتیب دارای بارهای $Z'e$ و Ze باشند .پتانسیل دافعه عبارت است از

$$V = \frac{ZZ'e^2}{r}$$

مسیـر پرتابه همیشه یک شاخه هذلولی است (شکل ۸ـ۳) که مرکز نیرو (هدف) در کانـــون بیرونی آن قرار دارد . بدون اثبات بیان می‌کنیم که رابطه بین b و θ عبارت است از*

$$b = \frac{ZZ'e^2}{2\varepsilon}\cot\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

که در آن ε انرژی پرتابه است .



شکل (۸ـ۳) دو مسیر هذلولی‌شکل با پارامترهای برخورد متفاوت‌درپراکندگی‌کولنی

با استفاده از (۸ـ۳) ، مقطع موثر کلاسیکی راترفورد به‌صورت

$$\sigma(\theta) = \left(\frac{ZZ'e^2}{4\varepsilon}\right)^2 \sin^{-4}\frac{\theta}{2} \qquad (۸-۴)$$

---

* به‌عنوان مثال ، به‌کتاب زیر مراجعه کنید

J,B. Marion " Classical Dynamics of Particles and Systemes" 2nd ed. Academic Press, New York, 1970.

به‌دست می‌آید .

با انتگرال‌گیری ، نتیجه می‌گیریم که مقطع موثر کل راترفورد ، در واقع ، واگرا می‌شود ، یعنی ،

$$\sigma_T = \left(\frac{ZZ'e^2}{4\varepsilon}\right)^2 \int \sin^{-4}\frac{\theta}{2}\, d\Omega = \left(\frac{ZZ'e^2}{4\varepsilon}\right)^2 2\pi \int_0^{\pi} \sin^{-4}\frac{\theta}{2}(\sin\theta\, d\theta) \to \infty$$

انتگرال در حد پائین ، $\theta \to 0$ ، یعنی $b \to \infty$ ،واگرا می‌شود . این واگرایی به‌این واقعیت مربوط می‌شود که پتانسیل $1/r$ خیلی بلند برد است ، درنتیجه ، حتی آن ذراتی که پارامتر برخورد آنها به‌بینهایت میل می‌کند پراکنده می‌شوند به‌طوریکه σ_T را واگرا می‌سازند . برای پتانسیلهای کوتاه بر دتر ، σ_T عموما" متناهی است .

بررسی مکانیک کوانتومی پراکندگی‌معمولا" به‌یکی از دو روش زیر انجام می‌گیرد . روش نخست ، پراکندگی مانا ،مقطع موثر را از ویژه حالتهای پیوسته پتانسیل پراکندگی به‌دست می‌آورد . این روش شبیه به‌روشی است که در مورد مسائل یک بعدی در فصل ۴ ، که در آن ضریب بازتاب $\mathscr{R}$ مشابه پارامتر برخورد است ، به‌کار برده شد .

روش دوم ،پراکندگی دینامیکی ،تحول یک ویژه‌حالت تکانه را در حضور یک‌پریشیدگی پراکننده تجزیه وتحلیل می‌کند .همان‌طورکه نشان خواهیم داد ، آهنگ‌گذار به‌ویژه‌حالتهای دیگرتکانه مستقیما" به‌مقطع موثر پراکندگی ارتباط پیدا می‌کند . هرچند که هردو روش‌اساسا" به‌مقطع موثرهای یکسانی منجر می‌شوند ،روش دینامیکی عمومی‌تر است . از یک نظر ،این روش مستقل از مکانیک موجی است . با این حال ، بحث خودرا با روشهای پراکندگی مانا شروع خواهیم کرد .

۲ــ نظریه کوانتومی مانای (حالت پا برجا) پراکندگی

در نظریه کلاسیکی ، قادر بودیم ارتباطی بین مسیرهای نامقید یک پرتابه و مقطع موثر پراکندگی متناظر برقرار کنیم . ارتباط مشابهی بین ویژه حالتهای مربوط به‌مقادیر پیوسته انرژی یک پتانسیل و مقطع موثر پراکندگی کوانتومی متناظر وجود دارد . بنابراین به‌آنچه‌که حالتهای پراکندگی معادله شرودینگر

$$\left\{-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + V(\mathbf{r})\right\}\psi = \varepsilon\psi \qquad (۵-۸)$$

نامیده می‌شود خواهیم پرداخت . فرض می‌شود که $V(\mathbf{r})$ برای مقادیر بزرگ $|\mathbf{r}|$ به‌سمت صفر میل می‌کند . چون ویژه تابعهای پراکندگی حالتهای نامقید را نشان می‌دهند ، نمی‌توانیم بخواهیم که در بینهایت صفر شوند . ولی ، می‌توانیم چند شرط مجانبی که با شرایط تجربی سازگار باشند تحمیل نمائیم .

در آزمایشهای پراکندگی ، ناحیه مورد توجه دوراز هدف واقع است . در این ناحیه مجانبی ،انتظار داریم یک شار فرودی مربوط به‌یک موج تخت که در امتداد محور z حرکت می‌کند ، یعنی ، e^{ikz} ، و یک شار پراکنده شده وابسته به‌یک موج کروی خروجی ، یعنی ، $f(\theta, \phi)e^{ikr}/r$ ، وجود داشته باشد . این جوابها مربوط به‌ذرات آزاد با انرژی $\varepsilon = \hbar^2k^2/2m$ می‌باشند . بنابراین شرط مجانبی

$$\psi \underset{r\to\infty}{\sim} e^{ikz} + f(\theta, \phi)\frac{e^{ikr}}{r} \qquad \left(k = \left(\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}\right)^{1/2}\right) \qquad (۶-۸)$$

را به‌جوابهای معادله شرودینگر (۸ــ۵)تحمیل می‌کنیم . اثبات اینکه جوابی با این شکل مجانبی وجود دارد به‌شرط اینکه پتانسیل خیلی بلند برد نباشد ، مشکل نیست . در زیر نشان خواهیم داد که پتانسیل کولنی ، با بردبلندش ، دارای جوابی با شکل مجانبی‌خواسته شده نیست . با این وجود ، جوابی دارد که برای پیداکردن مقطع موثر کولنی به‌قدر کافی به‌آن نزدیک است .

در حالی که برای یک ε معین ، جوابهای زیادی برای (۸ــ۵) وجود دارد ، مسئله ما پیداکردن جوابی است که رفتار مجانبی آن مانند رفتار (۸ــ۶) باشد . این کاربه‌آن سادگی که به‌نظر می‌رسد نیست . اما ، وقتی ψ ی مطلوب پیدا شد و شکل مجانبی آن ایجاد گردید، $f(\theta, \phi)$ می‌تواند مستقیما" به‌مقطع موثر ارتباط داده شود . برای انجام این کار ، شار فرودی با استفاده از معادله شار (۳ــ۹۶) ، از موج فرودی e^{ikz} به‌صورت زیر به‌دست‌می‌آید

$$J_{\text{inc}} = -\frac{i\hbar}{2m}\left[(e^{ikz})^*\frac{\partial}{\partial z}e^{ikz} - e^{ikz}\frac{\partial}{\partial z}(e^{ikz})^*\right] = \frac{\hbar k}{m}$$

همین‌طور ، شار پراکنده شده (شعاعی) از $f(\theta, \phi)e^{ikr}/r$ با استفاده از معادله شار (۳ ــ ۹۶) به‌دست می‌آید

$$J_{\text{scat}} = -\frac{i\hbar}{2m}|f(\theta, \phi)|^2\left[\left(\frac{e^{ikr}}{r}\right)^*\frac{\partial}{\partial r}\frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{ikr}}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{e^{ikr}}{r}\right)^*\right] = \frac{\hbar k}{m}\frac{|f(\theta,\phi)|^2}{r^2}$$

تعداد ذرات پراکنده شده در واحد زاویه حجمی عبارت است از

$$\frac{dN}{d\Omega} = J_{\text{scat}} r^2 = \frac{\hbar k}{m} |f(\theta, \phi)|^2$$

با تقسیم بر $J_{\text{inc}} = \hbar k/m$ ، مقطع موثر به‌صورت زیر به‌دست می‌آید

$$\sigma(\theta, \phi) = \frac{1}{J_{\text{inc}}} \frac{dN}{d\Omega} = |f(\theta, \phi)|^2 \qquad (۷-۸)$$

این رابطه دقیق است . ضریب مدولاسیون زاویه‌ای $f(\theta, \phi)$ **دامنه پراکندگی** نامیده می‌شود . در جدول (۸ ــ ۱) یک مقایسه اجمالی بین روشهای کلاسیکی و کوانتومی پراکندگی انجام داده‌ایم .

جدول (۸ــ۱)

مقایسه‌ای بین روشهای کلاسیکی و کوانتومی محاسبات پراکندگی

نظریه کلاسیکی	نظریه‌کوانتومی
(الف) برای پیداکردن مسیر (نامقید) یک ذره، قوانین نیوتن را برای یک انرژی، پارامتربرخورد، و پتانسیل‌پراکندگی‌داده‌شده حل کنید .	(الف) برای پیداکردن ویژه‌تابع (پیوسته)یک ذره با شکل مجانبی خواسته شده‌دریک‌انرژی و پتانسیل پراکندگی داده‌شده، معادله شرودینگر را حل کنید .
(ب) زاویه پراکندگی θ را برحسب پارامتر برخورد b پیدا کنید .	(ب) از شکل مجانبی جواب (الف) دامنه پراکندگی $f(\theta, \phi)$ را پیدا کنید .
(ج) مقطع موثر را با استفاده از $\sigma(\theta) = \frac{-b}{\sin\theta}\frac{db}{d\theta}$ محاسبه کنید	(ج) مقطع موثر را با استفاده از $\sigma(\theta, \phi) = \lvert f(\theta, \phi)\rvert^2$ محاسبه کنید

نظریه فوق را به‌تحلیل مکانیک کوانتومی پراکندگی راترفورد اعمال خواهیم کرد .

۳ ــ پراکندگی راترفورد (مورد کوانتومی)

مسئله کوانتومی راترفورد ، مثل مشابه کلاسیکی‌اش ، می‌تواند به‌طور دقیق‌حل شود . توجه خود را مستقیما" به‌حل مناسب معادله شرودینگر

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+\frac{K}{r}\right)\psi=\varepsilon\psi \qquad (۸-۸)$$

یا

$$\left(-\nabla^2+\frac{2mK}{\hbar^2 r}\right)\psi=k^2\psi$$

معطوف می‌کنیم که در آن

$$K=ZZ'e^2 \qquad \text{و} \qquad k=\left(\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}\right)^{1/2}$$

این معادله ، البته ، در مختصات کروی تفکیک‌پذیر است . اما جوابهای حاصله شکل مجانبی خواسته شده را ندارند . البته می‌توانیم از ترکیبات خطی این ویژه تابعهای کروی تبهگن برای ساختن شکل مجانبی مناسب استفاده کنیم . با این همه ، تفکیک متغیرها در (۸ ــ ۸) در مختصات سهموی ساده‌تر است . ویژه تابعهای سهموی به‌طور طبیعی با شرط مجانبی موردنظر مطابقت می‌کنند .

تبدیلی که مختصات سهموی را به‌دست دهد عبارت است از*

$$\xi=r(1+\cos\theta)=r+z$$
$$\eta=r(1-\cos\theta)=r-z$$
$$\phi=\phi=\tan^{-1}\frac{y}{x}.$$

ضرایب متریک ، لاپلاسی و عنصرحجم درمختصات سهموی می‌توانند به‌ترتیب به‌صورت زیر نوشته شوند

$$h_\xi=\left[\frac{(\eta+\xi)}{4\xi}\right]^{1/2}, \qquad h_\eta=\left[\frac{(\eta+\xi)}{4\eta}\right]^{1/2}, \qquad h_\phi=(\xi\eta)^{1/2}$$

$$\nabla^2=\left\{\frac{4}{\xi+\eta}\left[\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\xi\frac{\partial}{\partial\xi}\right)+\frac{\partial}{\partial\eta}\left(\eta\frac{\partial}{\partial\eta}\right)\right]+\frac{1}{\xi\eta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right\}$$

---

* تعریف و نمادگذاری مختصات سهموی در کتابهای مختلف تا حدودی متفاوت است .

و

$$d\mathbf{r} = \tfrac{1}{4}(\xi + \eta)\, d\xi\, d\eta\, d\phi$$

با به‌کاربردن جوابی به‌شکل

$$\psi(\xi, \eta, \phi) = F(\xi)G(\eta)\Phi(\phi)$$

معادله (۸ــ۸) به‌معادلات دیفرانسیل معمولی زیر تجزیه می‌شود

$$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} = -m_l^2\,\Phi, \qquad \frac{d}{d\xi}\left(\xi\frac{dF}{d\xi}\right) + \left(-\frac{m_l{}^2}{4\xi} + \frac{k^2}{4}\xi - \beta\right)F = 0$$

$$(۹ - ۸)$$

$$\frac{d}{d\eta}\left(\eta\frac{dG}{d\eta}\right) + \left(-\frac{m_l{}^2}{4\eta} + \frac{k^2\eta}{4} + \beta - \frac{Km}{\hbar^2}\right)G = 0$$

که در آنها m_l و β ثابتهای تفکیک هستند .

حاصلضربهای جوابهای این معادلات دیفرانسیل بدون توجه به‌مقادیر m_l و β ، منجر به‌جوابهای معادله شرودینگر (۸ــ۸) می‌شوند . سعی ما براین است‌که m_l و β را طوری انتخاب کنیم که ψ شکل مجانبی موردنظر

$$\psi \underset{r\to\infty}{\sim} e^{ikz} + f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}$$

را بگیرد . عدم حضور ϕ در دامنه پراکندگی نتیجه‌ای از خاصیت مرکزی‌بودن پتانسیل‌کولنی است .

جواب معادله ϕ در (۸ــ۹) عبارت است از $\Phi = e^{im_l\phi}$. اما چون شکل مجانبی مستقل از زاویه سمتی است ، جواب دقیق نمی‌تواند شامل ϕ باشد . بنابراین ثابت تفکیک را $m_l = 0$ انتخاب می‌کنیم به‌طوری که $\Phi \equiv 1$. در این صورت جواب به‌شکل

$$\psi(\xi, \eta) = F(\xi)G(\eta)$$

در می‌آید که در آن F و G جوابهای معادلات

$$\frac{d}{d\xi}\left(\xi\frac{dF}{d\xi}\right)+\left(\frac{k^2}{4}\xi-\beta\right)F=0 \qquad (۸-۱۰ \text{ الف})$$

و

$$\frac{d}{d\eta}\left(\eta\frac{dG}{d\eta}\right)+\left(\frac{k^2}{4}\eta+\beta-\frac{Km}{\hbar^2}\right)G=0 \qquad \left(k=\left(\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}\right)^{1/2}\right) \qquad (۸-۱۰ \text{ ب})$$

هستند . شکل مجانبی مطلوب می‌تواند در مختصات سهموی به‌صورت زیر بیان شود*

$$\psi(\xi,\eta)\underset{r-z=\eta\to\infty}{\sim} e^{ikz}+f\frac{e^{ikr}}{r}=e^{ikz}\left(1+\frac{fe^{ik(r-z)}}{r}\right)$$
$$=e^{ik(\xi-\eta)/2}\left(1+\frac{fe^{ik\eta}}{r}\right) \qquad (۸-۱۱)$$

از معادله (۸-۱۱) استنباط می‌شود که جواب دقیق باید به‌شکل

$$\psi(\xi,\eta)=e^{ik(\xi-\eta)/2}W(\eta)=e^{ik\xi/2}e^{-ik\eta/2}W(\eta)$$

باشد که در آن

$$W(\eta)\underset{\eta\to\infty}{\sim}\left(1+\frac{fe^{ik\eta}}{r}\right)$$

با قراردادن $F(\xi)=e^{ik\xi/2}$ در (۸-۱۰الف) ، نتیجه می‌گیریم $\beta=\frac{1}{2}ik$. با استفاده از این انتخاب برای ثابت تفکیک β و قراردادن $G(\eta)=e^{-ik\eta/2}W(\eta)$ در (۸-۱۰ ب) ، نتیجه می‌گیریم

$$\eta\frac{d^2W(\eta)}{d\eta^2}+(1-ik\eta)\frac{dW(\eta)}{d\eta}-\gamma W(\eta)=0 \qquad (۸-۱۲)$$

که در آن $\gamma=Km/\hbar^2k$.

معادله (۸-۱۲) همان معادله ابر هندسی است ، که قبلاً در فصل ۵ مورد بحث قرار

---

* چون ، بنا به‌تعریف ، باریکهٔ پراکنده شده در خارج از محور فرودی (z) مشاهده‌می‌شود، (یعنی ، $r>z$) ، حد مجانبی می‌تواند به‌جای $r\to\infty$ به‌صورت $(r-z)\to\infty$ نوشته شود .

گرفته است . جوابی که در مبداء ($\eta = 0$) خوش‌رفتار باشد سری ابر هندسی نامیده شده وبا $F(-i\gamma|1|ik\eta)$ نمایش داده می‌شود . بالاخره ، جواب کلی می‌تواند به‌صورت

$$\psi(\xi, \eta) = Ne^{ik(\xi-\eta)/2}F(-i\gamma|1|ik\eta) \qquad (۱۳-۸)$$

نوشته شود . برای سهولت ، ثابت ضربی N را به‌صورت*

$$N = \frac{\Gamma(1+i\gamma)}{e^{\pi\gamma/2}}$$

انتخاب خواهیم کرد .

معادله (۸ـ۱۳) جواب دقیقی از معادله شرودینگر است که به‌طور رضایت‌بخشی دارای شکل مجانبی‌مناسب است . با استفاده از روشهای تا اندازه‌ای پیشرفته ریاضی می‌توان نشان داد که شکل مجانبی (۸ـ۱۳) عبارت است از

$$\psi \underset{\eta\to\infty}{\sim} \exp i[kz + \gamma \ln kr(1-\cos\theta)] + f(\theta)\frac{\exp[i(kr - \gamma \ln 2kr)]}{r}$$

که در آن

$$f(\theta) = \frac{-\Gamma(1+i\gamma)}{\Gamma(1-i\gamma)}\frac{\gamma}{k}\frac{\exp[-i\gamma \ln \sin^2\theta/2]}{2\sin^2\theta/2} \qquad (۱۴-۸)$$

به‌نظر می‌آید که در اثر کوششمان ، (۸ـ۱۴) تا آنجا که ممکن است به‌شکل مجانبی مناسب نزدیک است . جمله‌های فاز لگاریتمی در توانهای موجهای فرودی و پراکنده شده بیانگر تغییر شکلهائی هستند که مشخصه پتانسیل بلندبرد کولنی است . این تغییرشکلها در جوابهای مجانبی برای پتانسیلهای‌کوتاه برد برطرف می‌شوند .خوشبختانه ،جملات‌لگاریتمی هیچ اشکالی ایجاد نمی‌کنند زیرا سریع‌تراز جملات خطی در توان (۸ـ۱۴) به‌سمت صفرمیل می‌کنند . سهم آنها درشارهای مجانبی‌را می‌توان نادیده‌گرفت و مقطع موثر را با استفاده‌از

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 = \frac{\gamma^2}{4k^2\sin^4\theta/2}\left|\frac{\Gamma(1+i\gamma)}{\Gamma(1-i\gamma)}\right|^2$$

---

* تابع گاما به‌صورت $\Gamma(z) = \int_0^\infty t^{z-1}e^{-t}\,dt$ تعریف شده است .

محاسبه کرد . چون $|\Gamma(1+i\gamma)| = |\Gamma(1-i\gamma)|$ ، بالاخره داریم

$$\sigma(\theta) = \left(\frac{\gamma^2}{4k^2}\right)\sin^{-4}\frac{\theta}{2} = \left(\frac{K}{4\varepsilon}\right)^2\sin^{-4}\frac{\theta}{2} = \left(\frac{ZZ'e^2}{4\varepsilon}\right)^2\sin^{-4}\frac{\theta}{2} \quad (۱۵-۸)$$

ازمقایسه این نتیجه با (۸-۴) مشاهده می‌کنیم که مقطع موثرهای کلاسیکی و کوانتومی راترفورد یکسان‌اند . این یکسانی باید تصادفی تلقی شود . مقطع موثرهای مکانیک کوانتومی برای سایر پتانسیلهای "خوش‌رفتار" معمولا" شامل $\hbar$ هستند و بنابراین با همتای کلاسیکی خود تفاوت دارند .

در عمل ، فرمول راترفورد به‌ندرت مشاهده می‌شود زیرا پتانسیل کولنی به‌وسیله‌عواملی کمکی تعدیل می‌شود . در آزمایش اصلی راترفورد که پراکندگی ذرات α از هسته‌های طلا را شامل می‌شد ، انحرافهایی از پتانسیل کولنی خالص در $r \sim 0$ (ساختار هسته‌ای) و $r \sim \infty$ (پوشش توسط الکترونهای اتمهای طلا) رخ داد .

همان‌طور که در بالا دیدیم ، پیداکردن جوابی برای معادله شرودینگر با شکل مجانبی مناسب‌کار ساده‌ای نیست . برای پتانسیلهای پراکندگی پیچیده‌تر وابسته به‌نیروهای‌هسته‌ای، روشهای دیگر و احتمالا" روشهای تقریبی لازم می‌شوند . دو روش را که عموما" در به‌دست آوردن مقطع های موثر به‌کار می‌روند بررسی خواهیم‌کرد . روش نخست ، بسط بورن ،وقتی‌قابل اعمال است که شدت λ ی پراکننده خیلی کوچک‌تر از انرژی فرودی باشد . در این حالت دامنه پراکندگی به‌صورت یک سری پریشیدگی شامل توانهای λ بیان می‌شود . این روش‌شبیه به‌روش رالی ــ شرودینگر است که برای حالتهای مقید به‌کار می‌رود .

روش دوم ،تحلیل موج جزئی ، منجر به‌مجموعی از نوع دیگر می‌شود و به‌شرطی مفید است که پتانسیل کوتاه برد باشد . این روش کاملا" مستقل از شدت پراکننده است . هم‌روش بورن و هم‌روش موج جزئی هردو مفید هستند ؛ روش خاص به‌کار برده شده‌معمولا" به‌انرژی باریکه فرودی و به‌طبیعت پتانسیل پراکندگی ، مثلا" شدت و برد آن ، بستگی دارد .

۴ــ بررسی پراکندگی مانا به‌روش پریشیدگی ــ سری‌بورن

توجه خودرا به‌معادله شرودینگر برای یک پتانسیل پراکندگی λV ،که پارامتر λ مشخص کننده شدت پراکننده است ، معطوف می‌کنیم . معادله‌ای که باید حل شود عبارت است از

$$\left(-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + \lambda V\right)\psi = \varepsilon\psi \quad (۱۶-۸)$$

که جواب آن باید در شرط مجانبی

$$\psi \underset{r\to\infty}{\sim} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f(\theta,\phi)\frac{e^{ikr}}{r} \qquad \left(|\mathbf{k}| = k = \left(\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}\right)^{1/2}\right)$$

صدق کند . بردار تکانه فرودی ، $\mathbf{k}$ ، در امتداد محور z قرار دارد (یعنی، $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = e^{ikz}$) . شرط مجانبی تنها برای پتانسیلهائی ممکن است که سریع‌تر از $1/r$ سقوط می‌کنند و بنابر این لازم است که پتانسیل در شرط

$$\lim_{r\to\infty} rV(r) \to 0$$

صدق کند .

اشکال حل معادله دیفرانسیل (۸ــ۱۶) این است که برای هر انرژی معین تعداد زیادی جوابهای تبهگن می‌تواند وجود داشته باشد . تنها جوابی را که شکل مجانبی مناسب را دارا باشد جستجومی‌کنیم . برای بیرون‌کشیدن این جواب ، بهتر است که (۸ــ۱۶) را به‌یک *معادله انتگرالی*،که فقط ویژه تابع موردنظر را به‌عنوان جواب قبول می‌کند ، تبدیل کنیم .

با قراردادن

$$u(\mathbf{r}) = \frac{2m}{\hbar^2}\lambda V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})$$

در (۸ــ۱۶) و جابه‌جاکردن جملات ، معادله شرودینگر خواهد شد

$$(\nabla^2 + k^2)\psi = u \qquad (۱۷-۸)$$

درواقع ،معادله اصلی (۸ــ۱۶)یک معادله دیفرانسیل همگن‌است که درآن هرکدام‌از جملات شامل ψ است .اما ، (۸ــ۱۷) اکنون یک معادله ناهمگن‌است که درآن $u(\mathbf{r})$ به‌عنوان"چشمه" یا ناهمگنی در نظر گرفته می‌شود . جواب عمومی (۸ــ۱۷) ترکیب شده است از جواب‌عمومی معادله همگن $(\nabla^2 + k^2)\psi_I = 0$ به‌اضافه هرجواب خصوصی معادله کلی $(\nabla^2 + k^2)\psi_s = u$. جواب عمومی عبارت است از $\psi = \psi_I + \psi_s$.

چون ψ_I معرف موردی است که درآن $u = 0$ (یا $V = 0$) است ، باید معرف موج تخت فرودی باشد . بنابراین قرار می‌دهیم $\psi_I = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$. سپس جواب خصوصی‌را به‌دست می‌آوریم و شرط

$$\psi_s \underset{r\to\infty}{\sim} f(\theta, \phi)\frac{e^{ikr}}{r} \qquad (= \quad \text{موج کروی خروجی}) \qquad (۱۸-۸)$$

را به‌آن تحمیل می‌کنیم . به‌بیان دیگر ، انتظار داریم که جواب خصوصی معرف موج پراکنده شده باشد . جواب موردنظر به‌شکل

$$\psi = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \psi_s \underset{r\to\infty}{\sim} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f(\theta, \phi)\frac{e^{ikr}}{r}$$

درمی‌آید . ما مسئله را به‌پیداکردن یک جواب خصوصی (۸–۱۷) که به‌طور مجانبی معرف‌یک موج کروی خروجی باشد تقلیل داده‌ایم .

فرض‌کنیم بتوانیم تابعی مثل $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ (تابع گرین) باخاصیت

$$(\nabla^2 + k^2)G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \qquad (۱۹-۸)$$

پیدا کنیم ، در این صورت تابع

$$\psi_s(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r}'\, G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')u(\mathbf{r}') \qquad (۲۰-۸)$$

خود به‌خود جوابی از (۸–۱۷) است . با جایگذاری مستقیم تحقیق می‌شود که

$$\begin{aligned}(\nabla^2 + k^2)\psi_s &= \int d\mathbf{r}'(\nabla^2 + k^2)G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')u(\mathbf{r}') \\ &= \int d\mathbf{r}'\, \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')u(\mathbf{r}') = u(\mathbf{r})\end{aligned}$$

بنابراین ψ_s واقعا" یک جواب است .

در حالی که تعداد زیادی تابع گرین ممکن با خاصیت موجود در (۸–۱۹)وجود دارد، فقط یکی از آنها که شرط

$$\psi_s = \int d\mathbf{r}'G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')u(\mathbf{r},) \underset{r\to\infty}{\sim} f(\theta, \phi)\frac{e^{ikr}}{r}$$

را برآورده می‌کند مورد توجه ما است . می‌توان نشان داد که تابع گرین خاص

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{-1}{4\pi}\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \qquad (۲۱-۸)$$

تمام خواص موردنظر را در بر دارد. همان‌طور که یک محاسبه مستقیم نشان می‌دهد (رک‌مسئله ۸ــ۶)، این تابع در (۷ــ۱۹) صدق می‌کند. اما خود ساختار آن برای r بزرگ $(r \gg r')$ شکل مجانبی درخواست شده به‌وسیله (۸ــ۱۸) را تضمین می‌کند. با استفاده از (۸ ــ ۲۰) و (۸ ــ ۲۱)، بالاخره، یک معادله انتگرالی اساسی برای پراکندگی به‌صورت

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \frac{\lambda 2m}{4\pi\hbar^2}\int d\mathbf{r}'\,\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\,\psi(\mathbf{r}')V(\mathbf{r}') \qquad (۸ - ۲۲)$$

خواهیم داشت.

درحالی‌که (۸ــ۲۲) در (۸ــ۱۶) صدق می‌کند، تنها به‌مفهوم صوری یک جواب است. معادله (۸ــ۲۲) به‌این جهت معادله‌انتگرالی نامیده می‌شود* که تابع مجهول ψ در داخل انتگرال در طرف راست قرار گرفته است. موفق شده‌ایم که معادله دیفرانسیل را به‌یک‌معادله انتگرالی‌تبدیل کنیم. مزیت این تبدیل آن است که در حالی که معادله دیفرانسیل، برای یک ε داده شده، جوابهای زیادی دارد، معادله‌انتگرالی‌تنها دارای جواب با شکل مجانبی مناسب است. متاسفانه، حل (۸ــ۲۲) معمولا" مشکل‌تر از حل معادله دیفرانسیل همتای آن است.

یک روش که می‌تواند در حل (۸ــ۲۲) به‌کار رود به‌روش تکراری موسوم است. این‌روش منجربه‌یک جواب به‌صورت یک سری از توانهای λ (موسوم به‌سری بورن) می‌شود و وقتی معتبر است که λ آنقدر کوچک باشد که سری را همگرا کند. جواب مرتبه صفر ($\lambda = 0$) آشکارا عبارت است از $\psi^{(0)} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ و بیانگر حالت پراکندگی صفر است. با قراردادن این‌جواب در انتگرال طرف‌راست (۸ــ۲۲)، جواب مرتبه‌اول $\psi^{(1)}$ را به‌دست خواهیم آورد. جواب‌مرتبه n ام با استفاده از $\psi^{(n-1)}$به‌طریق مشابهی به‌دست می‌آید، یعنی،

$$\psi^{(n)}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \frac{2m\lambda}{4\pi\hbar^2}\int d\mathbf{r}'\,\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\,\psi^{(n-1)}(\mathbf{r}')V(\mathbf{r}') \qquad (۸ - ۲۳)$$

تقریب مرتبه n ام منجر به‌یک سری از توانهای λ می‌شود که بالاترین توان آن λ^n است. وقتی $\psi^{(n)}$ پیدا شد، باید دارای شکل مجانبی

---

* به‌طور دقیق‌تر، یک معادله فردهلم[1] از نوع دوم است.

1- Fredholm

$$\psi^{(n)} \underset{r\to\infty}{\sim} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f(\theta,\phi)\frac{e^{ikr}}{r}$$

باشد که در آن $f(\theta,\phi)=\sum_{j=1}^{n} f^{(j)}(\theta,\phi)$. در هرکدام از جملات سری‌بورن برای $\psi^{(n)}$ جمله‌ای به‌نام دامنه مرتبه j ام بورن وجود دارد . مقطع موثر تا مرتبه n به‌وسیله

$$\sigma^{(n)} = \left|\sum_{j=1}^{n} f^{(j)}\right|^2$$

داده می‌شود . مقطع موثر دقیق درحد $n\to\infty$ به‌دست می‌آید ، به‌شرط اینکه سری همگرا شود ، و می‌توانیم بنویسیم

$$\sigma_{\text{exact}} = \left|\sum_{j=1}^{\infty} f^{(j)}\right|^2 \qquad (۲۴-۸)$$

۵ ــ تقریب اول بورن

اگر λ به‌اندازه کافی‌کوچک باشد ،کافی‌است تنها جملاتی را که از یک بار تکرار (۸ــ۲۲) به‌دست می‌آیند نگه داریم ، یعنی

$$\psi^{(1)}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \frac{m\lambda}{2\pi\hbar^2}\int d\mathbf{r}'\,\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}|'}\,V(\mathbf{r}')e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'} \qquad (۲۵-۸)$$

این جواب در همه‌جای‌فضا (برای λ ی کوچک) معتبر است . ولی ما فقط به‌آن دامنه‌پراکندگی علاقه‌مندیم‌که ازشکل مجانبی به‌دست می‌آید . برای $\mathbf{r}$ بزرگ ، می‌توان بسط زیررا انجام داد

$$\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \underset{r\gg r'}{\sim} \frac{\exp[i(kr - k\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}'/r)]}{r} = (e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'})\frac{e^{ikr}}{r} \qquad (۲۶-۸)$$

عبارت $\mathbf{k}' = k\mathbf{r}/r$ برداری‌است‌با بزرگی k که درامتداد شعاعی (پراکنده شده) قرار دارد .شکل مجانبی (۸ــ۲۵) خواهد شد

$$\psi^{(1)}(\mathbf{r}) \underset{r\to\infty}{\sim} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \frac{m\lambda}{2\pi\hbar^2}\left[\int d\mathbf{r}'e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}'}V(\mathbf{r}')\right]\frac{e^{ikr}}{r}$$

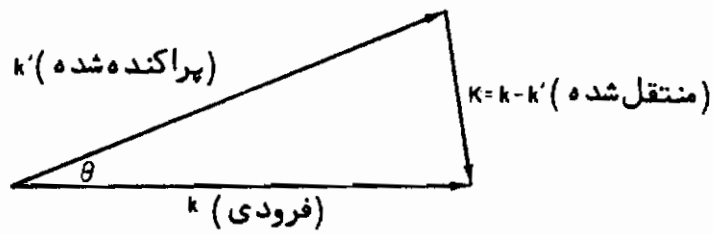
می‌توان قرار داد

$$f^{(1)}(\theta, \phi) = \frac{-m\lambda}{2\pi\hbar^2} \int d\mathbf{r}' e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \qquad (۲۷-۸)$$

را که در آن $f^{(1)}(\theta, \phi)$ *دامنه اول بورن* نامیده می‌شود ، در نظر گرفت . انتگرال می‌تواند به‌صورت

$$V(\mathbf{K}) = \int d\mathbf{r}' e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \qquad (۲۸-۸)$$

نوشته شود که در آن $\mathbf{K} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ بردار *انتقال تکانه* نامیده می‌شود . مفهوم هندسی آن در شکل (۸-۴) نشان داده شده است . تابع $V(\mathbf{K})$ *تبدیل فوریه* $V(\mathbf{r})$ است . مقطع موثر در تقریب



شکل (۸-۴) ارتباط بین بردارهای $\mathbf{K}$ ، $\mathbf{k}'$ و $\mathbf{k}$ و زاویه پراکندگی θ . توجه کنیم که برای پراکندگی کشسان ، $k = k'$ ، مثلث متساوی الساقین است .

اول بورن ، اکنون می‌تواند به‌صورت

$$\sigma^{(1)}(\theta, \phi) = |f^{(1)}(\theta, \phi)|^2 = \left(\frac{-m\lambda}{2\pi\hbar^2}\right)^2 |V(\mathbf{K})|^2 \qquad (۲۹-۸)$$

نوشته شود . توجه کنیم که $\sigma^{(1)}$ مستقل از علامت λ است و بنابراین برای پراکننده‌های جاذبه و دافعه یکسان است . در مرتبه‌های بالاتر علامت λ اهمیت پیدا می‌کند .

معادله (۸-۲۹) تقریب خوبی برای مقطع موثر است به‌شرطی که $f^{(1)}(\theta, \phi)/r$ برای تمام مقادیر r کوچک باشد ، یعنی ،

$$\frac{|f^{(1)}|}{r} = \left|\frac{m\lambda}{2\pi\hbar^2}\frac{V(\mathbf{K})}{r}\right| \ll 1 \qquad \text{معیار بورن}$$

این شرط برای اینکه سری بورن (۸-۲۴) همگرا باشد لازم است . به‌طور کاملا" عمومی این

شرط برای پتانسیلهای کوتاه برد ، وقتی انرژی باریکه فرودی در مقایسه با قدرت پتانسیل پراکندگی بزرگ باشد ، برقرار است*. اما ، تعیین میزان تحقق این شرط عموما" خیلی‌مشکل است و بستگی به‌طبیعت خاص تابع پتانسیل پراکندگی دارد .

زاویه پراکندگی θ (یعنی ، زاویه بین $\mathbf{k}$ و $\mathbf{k}'$) به‌طور ضمنی ، همان‌طور که از رابطه

$$K^2 = |\mathbf{k} - \mathbf{k}'|^2 = k^2 + k'^2 - 2kk' \cos\theta$$

دیده می‌شود ، در اندازهٔ $\mathbf{K}$ نهفته است . چون پراکندگی کشسان است (یعنی ، انرژی پایسته است) قرار می‌دهیم $k = k'$ و نتیجه می‌گیریم

$$K^2 = 2k^2(1 - \cos\theta) = 4k^2 \sin^2\frac{\theta}{2} \qquad \text{یا} \qquad K = 2k \sin\frac{\theta}{2} \qquad (۳۰ - ۸)$$

تبدیل فوریه پتانسیل نیروی مرکزی ، $V(r)$ ، می‌تواند بااستفاده از مختصات‌قطبی‌کروی محاسبه شود .

با انتخاب $\mathbf{K}$ در امتداد محور z' (به‌منظور انتگرال‌گیری) ، داریم

$$\begin{aligned} V(\mathbf{K}) &= \int d\mathbf{r}' e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}'} V(r') \\ &= 2\pi \int_0^\infty V(r') r'^2\, dr' \int_{-1}^{1} du' e^{iKr'u'} \qquad (u' = \cos\theta') \\ &= \frac{4\pi}{K} \int_0^\infty \frac{V(r') \sin Kr'}{r'} r'^2\, dr' \qquad (۳۱ - ۸) \end{aligned}$$

مشاهده می‌کنیم که برای یک پتانسیل نیروی مرکزی ، $V(\mathbf{K})$ تنها تابعی‌از بزرگی $\mathbf{K}$ است ، یعنی $V(\mathbf{K}) = V(K)$. چون $|\mathbf{K}| = K$ فقط زاویه قطبی θ را در بر دارد ، نتیجه می‌شود که $f^{(1)}$ و $\sigma^{(1)}$ ، همان‌طور که انتظار می‌رفت ، مستقل از ϕ هستند . مقطع موثر اول بورن برای $V(r)$ خواهد شد

---

* برای انرژیهای بالا ، معیار بورن می‌تواند به‌صورت زیر بیان شود

$$\frac{m\lambda^2 V_0^2 R^2}{2\hbar^2 \varepsilon} \ll 1$$

که در آن R برد موثر و λV_0 قدرت پتانسیل است . بنابراین وقتی تقریب بورن معتبراست که انرژی پراکندگی بزرگ و پتانسیل پراکندگی ضعیف و کوتاه‌برد باشد .

$$\sigma^{(1)}(\theta) = \left(-\frac{m\lambda}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \left|\frac{4\pi}{K}\int_0^\infty \frac{V(r')\sin Kr'}{r'}\, r'^2\, dr'\right|^2 \qquad (۳۲-۸)$$

چون پتانسیل کولنی با افزایش r به‌حد کافی سریع سقوط نمی‌کند ، معادله انتگرالی (۸–۲۲) و سری بورن برای پراکندگی راترفورد مناسب نیستند . با این وجود ، نتایج تقریب بورن دراین مورد جالب است . تبدیل فوریه پتانسیل کولنی $1/r$ ، با استفاده از (۸ – ۳۱)، عبارت است از*

$$V(K) = \frac{4\pi}{K}\int_0^\infty \frac{1}{r'}\frac{\sin Kr'}{r'}\, r'^2\, dr' = \frac{4\pi}{K^2}$$

مقطع موثر می‌شود

$$\sigma^{(1)}(\theta) = \left(-\frac{m\lambda}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \left|\frac{4\pi}{K^2}\right|^2 = \frac{4m^2\lambda^2}{\hbar^4 16k^4 \sin^4\theta/2}$$

با قراردادن $\varepsilon = \hbar^2k^2/2m$ و $\lambda = ZZ'e^2$ ، تقریب اول بورن می‌دهد

$$\sigma^{(1)}(\theta) = \left(\frac{ZZ'e^2}{4\varepsilon}\right)^2 \sin^{-4}\frac{\theta}{2}$$

که دقیقا" همان مقطع موثر کلاسیکی راترفورد است . این درست انطباق "تصادفی" دیگری با پتانسیل کولنی است .

تقریب بورن می‌تواند به‌طورمناسبی به‌پتانسیل مرکزی کوتاه بردتر اعمال شود .به‌عنوان مثال ، در مورد پتانسیل گاوسی (شکل ۸– ۵ الف)

$$V = \lambda \exp\left[-\left(\frac{r}{R}\right)^2\right]$$

تبدیل فوریه عبارت است از

---

* این انتگرال معمولا" با استفاده از یک ضریب همگرائی به‌صورت زیر انجام می‌شود

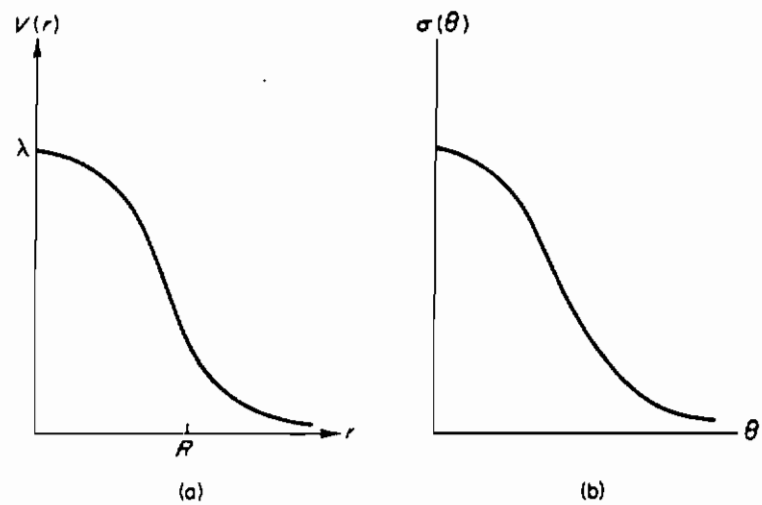
$$\int_0^\infty \sin Kr\, dr = \lim_{\alpha\to 0}\int_0^\infty \sin Kr\, e^{-\alpha r}\, dr = \frac{1}{K}$$

$$V(K) = \int d\mathbf{r}' e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}'} e^{-(r/R)^2} = (2\pi)^{3/2} R^3 e^{-K^2R^2/2}$$

مقطع موثر بورن می‌شود (شکل ۸ــ۵ ب)

$$\sigma^{(1)}(\theta) = \left(= \frac{m\lambda}{2\pi\hbar^2}\right)^2 |V(K)|^2 = \frac{m^2\lambda^2}{4\pi^2\hbar^4}(2\pi)^3 R^6 e^{-K^2R^2}$$
$$= \frac{2\pi m^2\lambda^2}{\hbar^4} R^6 \exp\left(-4k^2R^2\sin^2\frac{\theta}{2}\right)$$
$$= \frac{2\pi m^2\lambda^2}{\hbar^4} R^6 \exp\left[-\left(\frac{8m\varepsilon}{\hbar^2}\right)R^2\sin^2\frac{\theta}{2}\right]$$

توجه‌کنیم‌که انتظار می‌رود این مقطع موثر تنها وقتی درست باشدکه λ کوچک و ε بزرگ باشد (معیار بورن).



شکل (۸ــ۵) منحنی (الف) یک پتانسیل دافعه گاوسی و (ب) مقطع موثرمکانیک کوانتومی آن در تقریب بورن

۶ــ تقریبهای بالاتر بورن

اگر روش تکراری معادله‌انتگرالی(۸ــ۲۲) را ادامه دهیم، سری بورن را ایجادخواهیم کرد و به‌مجموعه‌ای از دامنه‌های $f^{(n)}$ بورن هدایت خواهیم شد که حاصل‌جمع آنها دامنه‌کل پراکندگی را به‌دست می‌دهد، یعنی،

$$f(\theta, \phi) = \sum_{j=1}^{\infty} f^{(j)}(\theta, \phi)$$

چند دامنه اول عبارتنداز*

$$f^{(1)} = -\frac{2m\lambda}{\hbar^2}\frac{1}{4\pi}V(\mathbf{k}-\mathbf{k}') = -\frac{m\lambda}{2\pi\hbar^2}V(\mathbf{K})$$

$$f^{(2)} = \left(\frac{2m\lambda}{\hbar^2}\right)^2\frac{1}{4\pi}\frac{1}{(2\pi)^3}\int\frac{V(\mathbf{k}-\mathbf{k}'')V(\mathbf{k}''-\mathbf{k}')\,d\mathbf{k}''}{(k''^2-k^2)}$$

$$f^{(3)} = -\left(\frac{2m\lambda}{\hbar^2}\right)^3\frac{1}{4\pi}\frac{1}{(2\pi)^6}\int\frac{V(\mathbf{k}-\mathbf{k}'')V(\mathbf{k}''-\mathbf{k}''')V(\mathbf{k}'''-\mathbf{k}')\,d\mathbf{k}''\,d\mathbf{k}'''}{(k'''^2-k^2)(k''^2-k^2)} \qquad (۳۳-۸)$$

وقتی $\lambda \to 0$ ، دامنه‌های بالاتر بورن سهم کمتری در مقطع موثردارند . برای هرپتانسیل کوتاه برد ، سری بورن عموما" همگرا می‌شود به‌شرطی که هم λ کوچک وهم ε به‌اندازه کافی بزرگ باشد . درمورد پراکندگی الکترون از اتمها ، انرژیهای پراکندگی درگیر معمولا"به‌خوبی در محدوده معیاربورن قرار دارند . اما ، برای پراکندگی هسته‌ای انرژیها باید از 100 MeV به‌بالا باشند .چون در برخوردهای هسته‌ای غالبا" انرژیهای پائین‌تر دخالت می‌کنند،معیار بورن نقض می‌شود و روشهای تحلیلی دیگری برای محاسبه مقطع موثرهای پراکندگی هسته‌ای مورد نیازاند . یک چنین روشی تحلیل موج جزئی نامیده می‌شود .این روش عموما" مستقل‌از قدرت پراکندگی است و می‌تواند حتی به‌پراکننده‌های قوی اعمال شود به‌شرط‌آنکه برد پتانسیل کوتاه باشد . همان طور که خواهیم دید این روش برای‌انرژیهای فرودی پائین مفیدترین است .

۷ــ روش امواج جزئی

این روش نخستین‌بار توسط رالی در تجزیه و تحلیل او از پراکندگی صوت از موانع ارائه شد . بعدا" توسط فاکسن(۱) و هولتزمارک(۲) به‌مسائل پراکندگی مکانیک کوانتومی‌اعمال شد .

---

* در انتگرالده‌های دامنه‌های (۸ــ۳۳) تکینگی‌هایی مربوط به‌نقاطی که در آنها مخرج صفر می‌شود ، وجود دارد . بنابراین در محاسبه $f^{(2)}$ و $f^{(3)}$ ابهامهائی وارد می‌شود . این‌اشکال کوچک می‌تواند با جایگذاریهای $(k^2-k''^2)\to(k^2-k''^2+i\Delta)$ ، $(k^2-k''^2)\to(k^2-k''^2+i\Delta)$ و غیره در مخرجها و قراردادن $\Delta\to 0$ بعدازاینکه انتگرال (منحنی الخط) محاسبه شد ، رفع گردد .

1- Faxen 2- Holtsmark

مقطع موثر برای ذره بدون اسپین در یک پتانسیل نیروی مرکزی $V(r)$ می‌تواند به‌آسانی از یک ویژه تابع انرژی ψ_ε محاسبه شود به‌شرط اینکه :

(الف) ψ_ε در معادله شرودینگر

$$\left\{-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}+V(r)\right\}\psi_\varepsilon=\varepsilon\psi_\varepsilon \qquad \left(rV(r)\underset{r\to\infty}{\to}0\right) \qquad (۸-۳۴ \text{ الف})$$

صدق کند و

(ب) ψ_ε دارای شکل مجانبی

$$\psi_\varepsilon \underset{r\to\infty}{\sim} e^{ikz}+f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r} \qquad \left(k=\left(\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}\right)^{1/2}\right) \qquad (۸-۳۴ \text{ ب})$$

باشد ، چون در مختصات کروی کار خواهیم کرد بهتر است که از اتحاد (رک ۵ ــ ۵۹)

$$e^{ikz}=e^{ikr\cos\theta}\equiv\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^lP_l(\cos\theta)j_l(kr) \qquad (۸-۳۵)$$

در (۸ــ۳۴ ب) استفاده کنیم . تفکیک (۸ــ۳۴ الف) در مختصات کروی نتیجه می‌دهد

$$\psi=\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m_l=-l}^{l}a_{lm_l}Y_{lm_l}(\theta,\phi)R_{kl}(r)$$

که در آن R_{kl} جواب خوشرفتار معادله شعاعی زیر است

$$\left\{\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right)+\left[k^2-\frac{2m}{\hbar^2}V(r)-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]\right\}R_{kl}(r)=0 \qquad \left(k=\left(\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}\right)^{1/2}\right)$$

$$(۸-۳۶)$$

چون شکل مجانبی (۸ــ۳۶) باید مستقل از زاویه سمتی ϕ باشد کافی است فقط جملاتی را نگاه داریم که در آنها $m_l=0$ است . بنابراین باید آن ضرایب a_l در جواب دقیق را پیدا کنیم که منجر به‌شکل مجانبی مناسب شود ، یعنی

$$\sum_{l=0}^{\infty}a_lP_l(\cos\theta)R_{kl}(r)\underset{r\to\infty}{\sim}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^lP_l(\cos\theta)j_l(kr)+f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r} \qquad (۸-۳۷)$$

جواب معادله شعاعی (۸ــ۳۶) وقتی $V = 0$ است به‌طور ساده عبارت است از $j_l(kr)$ ؛ این جواب دارای شکل مجانبی

$$j_l(kr) \underset{r\to\infty}{\sim} \frac{\sin(kr - \frac{1}{2}l\pi)}{kr}$$

است . سپس شکل مجانبی $R_{kl}(r)$ در (۸ــ۳۶) را برای حالت عمومی که در آن $V \neq 0$ است پیدا خواهیم کرد . توجه کنیم که در بینهایت V به‌سمت صفر میل می‌کند به‌طوری‌که (۸ــ۳۶) به‌سمت معادله ذره‌آزاد میل می‌کند . ازاین نکته چنین استنباط می‌شودکه چون پرتابه همیشه در بینهایت آزاد است ، R_{kl} و $j_l(kr)$ باید دارای شکلهای مجانبی مشابهی باشند . در واقع ، تا وقتی V سریع تر از $1/r$ به‌سمت صفر میل می‌کند* ، شکل مجانبی جواب شعاعی‌خواهد بود

$$R_{kl}(r) \underset{r\to\infty}{\sim} \frac{\sin(kr - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l)}{kr}$$

δ_l جابه‌جائی فاز جزئی l ام نامیده می‌شود و میزانی از درجه تفاوت $R_{kl}(r)$ و $j_l(kr)$ در بینهایت است . چون پتانسیل پراکندگی مسئول این تفاوت است ، انتظار داریم که δ_l ، تا اندازه‌ای ، شکل مقطع موثر پراکندگی را تعیین کند . با قراردادن شکلهای مجانبی $R_{kl}(r)$ و $j_l(kr)$ در (۸ــ۳۷) ، خواهیم داشت

$$\sum_{l=0}^{\infty} a_l P_l(\cos\theta) \frac{\sin(kr - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l)}{kr}$$
$$= \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l P_l(\cos\theta) \frac{\sin(kr - \frac{1}{2}l\pi)}{kr} + f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r} \qquad (۳۸-۸)$$

با مرتب‌کردن جملات داریم

$$\sum_{l=0}^{\infty} \frac{P_l(u)}{kr}\left[a_l \sin\left(kr - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l\right) - (2l+1)i^l \sin\left(kr - \frac{1}{2}l\pi\right)\right] = f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}$$

یا

---

* قبلا" دیدیم که یک پتانسیل $1/r$ از شکل مجانبی‌مطلوب دربینهایت انحراف پیدا می‌کند.

$$\sum_{l=0}^{\infty} \frac{P_l(u)}{2ik} \left[e^{-\frac{1}{2}i\pi l}(a_l e^{i\delta_l} - (2l+1)i^l) \frac{e^{ikr}}{r} - e^{\frac{1}{2}il\pi}(a_l e^{-i\delta_l} - (2l+1)i^l) \frac{e^{-ikr}}{r} \right]$$
$$= f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \qquad (۳۹-۸)$$

که در آن $u = \cos\theta$. طرف‌های راست و چپ (۸–۳۹) تنها در صورتی می‌توانند برابر باشند که ضریب e^{-ikr}/r صفر شود ، یعنی ،

$$a_l = (2l+1)i^l e^{i\delta_l}$$

این رابطه ضرایب را در (۸–۳۷) تعیین می‌نماید . بالاخره ، این نتیجه را در (۸–۳۹) می‌بریم و خواهیم داشت

$$\sum_{l=0}^{\infty} \frac{P_l(u)}{2ik} e^{-il\pi/2}(2l+1)i^l(e^{i2\delta_l} - 1) \frac{e^{ikr}}{r} = f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \qquad (۴۰-۸)$$

و به‌دنبال آن نتیجه می‌گیریم

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{P_l(u)}{2ik} e^{-il\pi/2}(2l+1)i^l(e^{i2\delta_l} - 1)$$

یا

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)e^{i\delta_l} \sin\delta_l P_l(\cos\theta) \qquad (۴۱-۸)$$

این رابطه برای دامنه پراکندگی ، گرچه جمع و جور نیست ، رابطه دقیقی است . سری فوق یک سری پریشیدگی نیست و مستقل از قدرت پراکننده است . تنها محدودیت دراعتبار آن این است که پتانسیل سریع‌تر از پتانسیل $1/r$ سقوط کند . برای محاسبه مقطع موثر، نخست معادله‌شعاعی (۸–۳۶) را برای هرمقداری از l حل می‌کنیم . بعداز پیداکردن $R_{kl}(r)$ شکل مجانبی آنرا بررسی می‌کنیم و δ_l را ، که هرکدام از آنها بستگی به k (انرژی) دارد، به‌دست می‌آوریم . معادله (۸–۴۱) فورا" دامنه‌پراکندگی را به‌دست می‌دهد . بالاخره ، مقطع موثر با استفاده از

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2$$
$$= \frac{1}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{l'=0}^{\infty} (2l+1)(2l'+1)e^{i(\delta_l - \delta_{l'})} \sin\delta_l \sin\delta_{l'} P_l(u)P_{l'}(u) \qquad (۴۲-۸)$$

به‌دست‌می‌آید .توجه‌کنیم که‌اگر $V = 0$ باشد ، تمام δ_l هاصفر می‌شوند و $\sigma(\theta) = 0$ ،همان‌طور که انتظار می‌رود.

مقطع مؤثر کل خواهد بود

$$\sigma_T = \int \sigma \, d\Omega = 2\pi \int_{-1}^{1} \sigma(u) \, du = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l \qquad (۴۳-۸)$$

در به‌دست‌آوردن (۸ـ۴۳) ، از رابطه تعامد

$$\int_{-1}^{1} du \, P_l(u) P_{l'}(u) = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'}$$

استفاده شده است . توجه کنیم که

$$\operatorname{Im} f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l P_l(u)$$

چون برای $\theta = 0$ داریم $P_l(1) = 1$ ، نتیجه می‌گیریم

$$\frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} f(0) = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l = \sigma_T \qquad (۴۴-۸)$$

معادله (۸ـ۴۴) دقیق است وقضیه نوری نظریه پراکندگی را بیان می‌دارد . در واقع ،قسمت موهومی $f(0)$ متناسب با تعداد ذراتی است که از جهت تابش منحرف می‌شوند . قضیه نوری این عدد را به‌تعداد کل ذراتی که در باریکه پراکنده‌شده ظاهر می‌شود ربط می‌دهد و بنابر این بیانی است از پایستگی احتمال . این قضیه مشابه با رابطه $\mathscr{R} + \mathscr{T} = 1$ در پراکندگی یک بعدی است .

۸ـ تقریب جابه‌جائی فاز جزئی

روش امواج جزئی منجر به‌مقطع موثری به‌شکل یک مجموع بینهایت جمله می‌شود .بنابر این وقتی که چند جمله اول تقریب درستی را نشان دهد ، مفیدترین است . این روش ، در واقع ، باریکهٔ فرودی را برحسب مقادیر l آنها (تکانه زاویه‌ای) به‌امواج جزئی تجزیه‌می‌کند. هر موج دارای دامنه پراکندگی مشخصی است که به‌وسیله جابه‌جائی فاز آن ، δ_l ، تعیین می‌شود . دامنهٔ کل برابر است با مجموع دامنه‌های امواج جزئی .

امواجی که l آنها بزرگ است متناظر با ذراتی هستند که پارامتر برخورد آنها بزرگ است . همان‌گونه که در مورد کلاسیکی ملاحظه‌کردیم ، این ذرات به‌طور قابل‌ملاحظه‌ای پراکنده نمی‌شوند . بنابراین سهم مهمی در مقطع موثر ندارند و می‌توانند نادیده گرفته شوند . مقطع موثر تقریبی به‌دست‌آمده در صورتی درست است که پتانسیل کوتاه برد باشد .

از نظر کلاسیکی ، برای‌یک پتانسیل سخت-کره به‌شعاع R ، آن ذراتی که پارامتربرخورد آنها در گستره $b > R$ است پراکنده نخواهند شد . با ضرب و تقسیم طرف چپ در تکانه زاویه‌ای ، شرط فوق می‌تواند به‌صورت $bp/p > R$ بیان شود . با قراردان

$$bp = L = \hbar(l(l+1))^{1/2} \simeq \hbar l = \text{تکانه زاویه‌ای}$$

و $p = (2m\varepsilon)^{1/2} = \hbar k$ ، به‌شرط

$$\frac{\hbar l}{\hbar k} > R \qquad \text{یا} \qquad l > kR$$

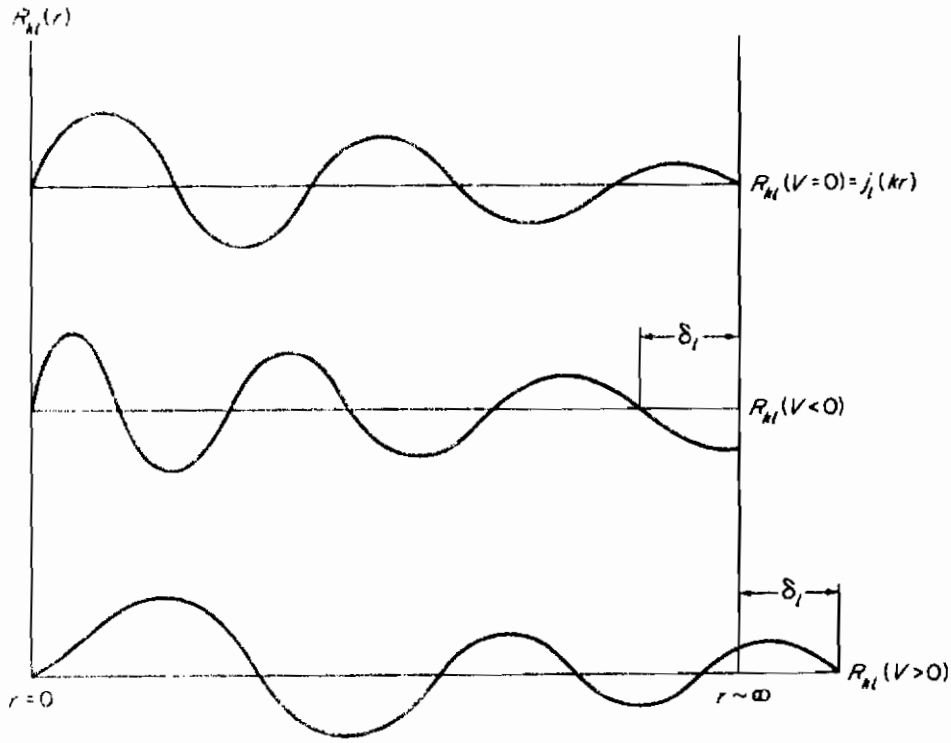
خواهیم رسید . به‌طور کلی‌تر ، اگر R برد پتانسیل باشد ، آن امواجی که برای آنها $l \gg l_{max} = kR$ باشد از نظر مکانیک کوانتومی به‌اندازه قابل ملاحظه‌ای پراکنده نمی‌شوند . برای یک مقدار k (انرژی) و برد معین ، مقطع موثر تقریبی (۸–۴۲) می‌تواند به‌صورت

$$\sigma \simeq \left| \sum_{l=0}^{l\,max} \frac{1}{k}(2l+1)e^{i\delta_l} \sin\delta_l P_l(\cos\theta) \right|^2 \qquad (۸-۴۵)$$

نوشته شود . برای یک برد مشخص، l_{max} با کاهش k کاهش می‌یابد ،درنتیجه،تعدادکمتری از جملات برای به‌دست‌آوردن مقطع موثر تقریبی لازم است . به‌طور معادل ، وقتی تعداد ثابتی از جملات در (۸–۴۵) نگاه داشته می‌شوند ، دقت مقطع موثر با کاهش k افزایش می‌یابد . بنابراین ،این تقریب ، برخلاف تقریب بورن ، برای انرژیهای فرودی پائین اعتبار دارد .

جابه‌جائی فاز جزئی l ام ، δ_l ، به‌انرژی‌فرودی (یا k)وبه‌طبیعت پتانسیل‌پراکندگی بستگی دارد . برای بعضی از پتانسیلها ، معمولا" جاذبه ، موج پراکنده شده به‌سوی پراکننده کشیده می‌شود ،و لذا یک δ_l مثبت ایجادمی‌کند . عکس این مطلب عموما" برای‌پتانسیلهای دافعه صادق است (شکل ۸–۶) .این مطلب می‌تواند بدین‌ترتیب درک شود که برای پتانسیلهای جاذبه ،$V < 0$ ، انرژی‌جنبشی در مجاورت پراکننده زیاد است . پارامتر

$k = (2m(\varepsilon - V)/\hbar^2)^{1/2}$ نیز بزرگ است و لذا یک طول موج دوبروی منقبض شده $\lambda = 2\pi/k$ ایجاد می‌کند . بنابراین تابع موج به‌طرف پراکننده کشیده می‌شود . برای پتانسیلهای دافعه، انرژی جنبشی و پارامتر k در نزدیکی پراکننده کمترین مقدارشان را دارند ، در نتیجه طول موج بیشترین مقدار را دارد و موج از پراکننده دور می‌شود .



شکل (۸ــ۶) تاثیر پتانسیلهای نیروی مرکزی جاذبه و دافعه روی شکل مجانبی ویژه تابعهای شعاعی .

اگر فرض کنیم که سهم عمده σ در (۸ــ۴۵) از امواج s $(l = 0)$ حاصل می‌شود، این مقطع موثر به‌طور حساسی به δ_0 بستگی دارد . اگر برای یک انرژی داده شده δ_0 برابر با $n\pi$ شود ، داریم $\delta_l = 0$ و (۸ــ۴۵) یک افت چشمگیری درمقطع موثرپراکندگی پیشگویی می‌کند . این اثر به‌طور تجربی در پراکندگی الکترونهای کم انرژی (~ 1 eV) از اتمهای گاز بی‌اثر مشاهده شده‌است . غیاب چشمگیر پراکندگی در این انرژی ، اثر رامسور ــ تونزند [3] نامیده می‌شود . این اثر در پراکندگی الکترونها از اتمهای گاز بی‌اثر مشاهده می‌شود که در آن در بعضی انرژیها ، الکترونها دچار افت چشمگیری در پراکندگی می‌شوند . در دیگر انرژیها ، جابه‌جائی فاز می‌تواند برابر با $\delta_0 = (n + \frac{1}{2})\pi$ شود ، که در این صورت پراکندگی تشدید

3- Townsend

می‌شود . در این انرژیها ، تشدیدهای s ــ موج داریم . تشدیدهای مشابهی می‌تواند بـرای مقادیر بالاتر l رخ دهد .

۹ ــ پراکندگی s ــ موج

تقریب موج جزئی را به‌محاسبه مقطع موثر وابسته به‌پتانسیل

$$V = V_0 \quad ، \quad 0 < r \leqslant R \quad \text{برای}$$

و

$$V = 0 \quad ، \quad r > R \quad \text{برای}$$

اعمال خواهیم کرد . جابه‌جاییهای فاز با حل معادله شعاعی متناظر

$$\frac{d^2}{dr^2} u_{kl}(r) + \left(K^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right) u_{kl}(r) = 0 \qquad (0 < r \leqslant R)$$

$$\frac{d^2}{dr^2} u_{kl}(r) + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right) u_{kl}(r) = 0 \qquad (r > R) \qquad (۴۶-۸)$$

به‌دست می‌آیند که در آنها قرار داده‌ایم

$$R_{kl} = \frac{u_{kl}}{r}, \qquad k = \left(\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}\right)^{1/2},$$

$$K = \left(\frac{2m(\varepsilon - V_0)}{\hbar^2}\right)^{1/2} \qquad \text{یا} \qquad K = [k^2 - (2mV_0/\hbar^2)]^{1/2}$$

جوابهای قابل قبول برای R_{kl} باید در همه‌جا متناهی ، پیوسته و مشتق‌پذیر باشند .ما توجه خود را به‌جوابهای sــ مـوج معطـوف‌می‌کنیم . جواب داخلی $(r \leq R)$ برای $l = 0$ در (۴۶ــ۸) عبارت است از

$$u_{k0} = A \sin Kr + B \cos Kr$$

اما ، ویژه تابعهای شعاعی

$$R_{kl} = \frac{u_{kl}(r)}{r}$$

در صورتی و فقط در صورتی می‌توانند در مبداء متناهی بمانند که $u_{kl}(0) = 0$ باشد . این مطلب ایجاب می‌کند که قرار دهیم $B = 0$ و بنویسیم

$$u_{k0}(r \leqslant R) = A \sin Kr \qquad (۴۷-۸)$$

جواب خارجی می‌تواند به‌صورت

$$u_{k0}(r > R) = D \sin(kr + \delta_0) \qquad (۴۸-۸)$$

نوشته شود . پیوستگی R_{k0} و مشتق آن در $r = R$ ایجاب می‌کند که*

$$\left.\frac{u'_{k0}\ (r \leqslant R)}{u_{k0}\ (r \leqslant R)}\right|_{r=R} = \left.\frac{u'_{k0}\ (r > R)}{u_{k0}\ (r > R)}\right|_{r=R}$$

که ، با استفاده از (۸ــ۴۷) و (۸ــ۴۸) ، خواهد شد

$$K \cot KR = k \cot(kR + \delta_0)$$

یا

$$\left(\frac{2m(\varepsilon - V_0)}{\hbar^2}\right)^{1/2} \cot\left(\frac{2m(\varepsilon - V_0)}{\hbar^2}\right)^{1/2} R = \left(\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}\right)^{1/2} \cot\left(\left(\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}\right)^{1/2} R + \delta_0\right)$$

$$(۴۹-۸)$$

جابه‌جایی فاز s ــ موج از حل (۸ــ۴۹) برای δ_0 برحسب ε ، R و V_0 ، به‌دست می‌آید . با استفاده از (۸ــ۴۵) ، مقطع موثر s ــ موج می‌شود

$$\sigma^{(s)} = \frac{1}{k^2} \sin^2 \delta_0$$

تشدیدهای s ــ موج وقتی رخ می‌دهند که $\delta_0 = (n + \frac{1}{2})\pi$ و در نتیجه $\sin^2 \delta_0$ باشد . انرژی فرودی تشدیدی ε_n ، که در آن بیشینه پراکندگی موجهای s (برای R و V_0 ثابت)

---

* شرط پیوستگی تابع و مشتق آن می‌تواند با این خواسته که مشتق لگاریتمی تابع پیوسته باشد ، برقرار گردد . از نظر ریاضی

$$\frac{u_1'}{u_1} = \frac{u_2'}{u_2}$$

با رابطه $(\ln u_1)' = (\ln u_2)'$ معادل است .

رخ می‌دهد ، از جوابهای (۸–۴۹) با قراردادن $\delta_0 = (n + \frac{1}{2})\pi$ به‌دست می‌آید .

اثری از نوع رامسور در انرژیهایی در (۸–۴۹) رخ می‌دهد که برای آنها داشته باشیم $\delta_0 = n\pi$. در این مورد $\sin^2 \delta_0 = 0$ و هیچ نوع پراکندگی s ــ موج صورت نمی‌گیرد .

مقطع موثر s ــ موج دقیقا" مقطع موثر حقیقی را توصیف می‌کند به‌شرط اینکه $kR \ll 1$ یا $\varepsilon \ll \hbar^2/2mR$ ، یعنی ، انرژیهای فرودی پائین باشند . از طرف دیگر ، وقتی انرژیها بالا هستند ، یعنی $\varepsilon \gg V_0$ ، مقطع موثر بورن معمولا" تقریب بهتری را نشان می‌دهد .

قابل توجه است که در مورد حدی $V_0 \to \infty$ (کره نفوذناپذیر) ، تقریب بورن کلا" غیرقابل اعمال است . اما ، روش امواج جزئی می‌تواند مستقیما" اعمال شود . جواب داخلی برای $V_0 = \infty$ خواهد شد

$$u_{k0}(r \leqslant R) \equiv 0$$

شرط پیوستگی در $r = R$ برای امواج s می‌شود

$$u_{k0}(\leqslant R)|_{r=R} = B \sin(kR + \delta_0) = 0$$

که از آن نتیجه می‌شود $\delta_0 = -kR$. مقطع موثر دیفرانسیلی s ــ موج برای یک کره نفوذناپذیر می‌شود

$$\sigma^{(s)} = \frac{1}{k^2} \sin^2 \delta_0 = \frac{1}{k^2} \sin^2 (-kR)$$

در حد انرژیهای پائین ، $kR \ll 1$ ، داریم

$$\sigma \simeq \sigma^{(s)}(kR \ll 1) = \frac{1}{k^2} \sin^2(-kR) \simeq \frac{1}{k^2} (-kR)^2 = \frac{1}{k^2} k^2 R^2$$

مقطع موثر کل s ــ موج به‌صورت زیر به‌دست می‌آید

$$\sigma_T \simeq \sigma_T^{(s)} = 4\pi R^2 \qquad (۸-۵۰)$$

توجه‌کنیم که (۸–۵۰) شامل $\hbar$ نیست . با این وجود ،این نتیجه نمی‌تواند یک‌نتیجه‌کلاسیکی باشد زیرا انتظار این است که حد کلاسیکی در انرژیهای بالا باشد*. به‌علاوه ، مقطع موثر برای کره سخت به‌طور منطقی فقط πR^2 است . ضریب ۴ در (۸–۵۰) از تداخل آثار مکانیک

---

* در واقع می‌توان نشان داد که وقتی $\varepsilon \to \infty$ ، مقطع موثر کوانتومی به‌سمت $\sim 2\pi R^2$ میل کند که دوبرابر نتیجه کلاسیکی است . این اختلاف آشکار به‌این واقعیت مربوط می‌شود که پتانسیل سخت ــ کره به‌طور ناگهانی در $r = R$ تغییر می‌کند .

کوانتومی سرچشمه می‌گیرد . این واقعیت که $\hbar$ حضور ندارد ، باید به‌ناپیوستگی غیرفیزیکی پتانسیل پراکندگی در $r = R$ نسبت داده شود .

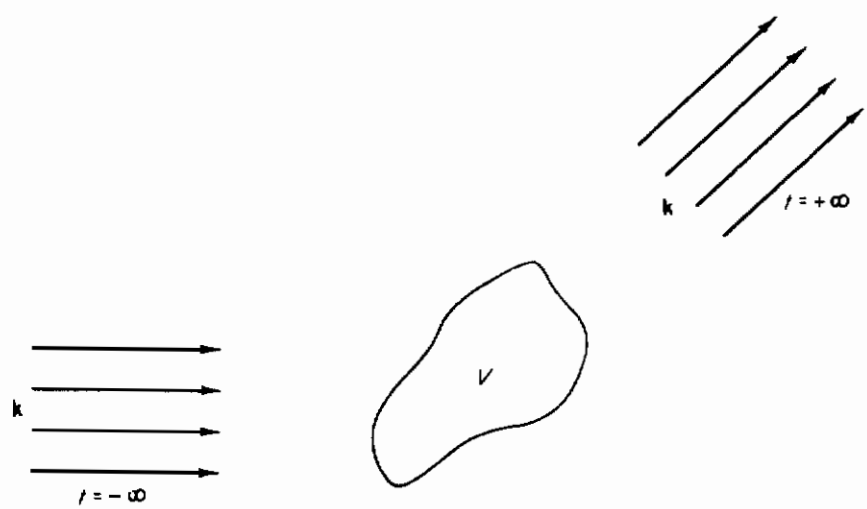
۱۰ ــ پراکندگی کوانتومی دینامیکی و گذارها

روشهای پراکندگی بحث شده در بالا برای پراکندگیهای کشسان ذرات از پراکننده ثابت کاملا" عمومی هستند ، اما نمی‌توانند به‌مسائل غیرمکانیک موجی تعمیم داده شوند .یک‌مسئله ازاین قبیل ،به‌عنوان مثال ، پراکندگی کامپتونی فوتونها از الکترونهای آزاداست ، که شامل پراکندگی میدان الکترومغناطیسی کوانتیده است .

سپس صورتبندی‌ای را توسعه می‌دهیم‌که می‌تواند برای تمام فرایندهای کوانتومی‌اساسی طبیعی به‌کار رود . این صورتبندی را به‌پراکندگی ذرات از پتانسیلهای ثابت ، به‌منظوراثبات هم‌ارزی آن با روشهای مانای بحث شده در فوق ، اعمال خواهیم کرد .

روش دینامیکی پراکندگی براساس قاعده طلائی فرمی استوار است و پدیده پراکندگی‌را به‌عنوان فرایند گذار از یک حالت اولیه تکانه $|\mathbf{k}\rangle$ به‌یک حالت نهائی دیگر $|\mathbf{k}'\rangle$ در نظر می‌گیرد . گذار به‌وسیله پریشیدگی پراکندگی λV (شکل ۸ــ۷) القاء می‌شود . میزان‌احتمالی که با آن ذرات از $|\mathbf{k}\rangle$ به $|\mathbf{k}'\rangle$ می‌روند ، از (۷ــ۷۲) ، عبارت است از

$$R_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \left[\frac{2\pi}{\hbar}\left|\sum_{j=1}^{\infty}\lambda^j M_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{(j)}\right|^2 \rho(\mathbf{k}')\right]_{\varepsilon_{\mathbf{k}}=\varepsilon_{\mathbf{k}'}} \qquad (۸-۵۱)$$



شکل (۸ــ۷) فرایند پراکندگی که به‌صورت یک گذار از یک حالت اولیه تکانه ($t = -\infty$) به‌یک حالت نهائی آن (در $t = +\infty$) نشان داده‌شده است .گذار به‌وسیله پتانسیل پراکندگی القاء شده است .

جمله $M_{\mathbf{kk}'}^{(j)}$ معرف دامنه‌گذار مرتبهٔ j ام است. چند دامنه اول، از (۷ – ۷۲)، با قراردادن $d\mathbf{n} = [\mathscr{V}/(2\pi)^3]\, d\mathbf{k}$، به‌صورت زیر به‌دست می‌آیند*

$$M_{\mathbf{kk}'}^{(1)} = \langle \mathbf{k}' | \hat{V} | \mathbf{k} \rangle$$

$$M_{\mathbf{kk}'}^{(2)} = \frac{\mathscr{V}}{(2\pi)^3} \int \frac{\langle \mathbf{k}' | \hat{V} | \mathbf{k}'' \rangle \langle \mathbf{k}'' | \hat{V} | \mathbf{k} \rangle \, d\mathbf{k}''}{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}''}}$$

$$M_{\mathbf{kk}'}^{(3)} = \left(\frac{\mathscr{V}}{(2\pi)^3}\right)^2 \int \frac{\langle \mathbf{k}' | \hat{V} | \mathbf{k}'' \rangle \langle \mathbf{k}'' | \hat{V} | \mathbf{k}''' \rangle \langle \mathbf{k}''' | \hat{V} | \mathbf{k} \rangle \, d\mathbf{k}'' \, d\mathbf{k}'''}{(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}''})(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'''})} \qquad (۵۲ - ۸)$$

برای مسئله پراکندگی موردنظر، ویژه تابعهای بهنجار شده در جعبه

$$|\mathbf{k}\rangle \to \psi_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{\mathscr{V}}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \qquad (۵۳ - ۸)$$

ویژه حالتهای ذره آزاد را نشان خواهد داد. انرژیها و شارهای متناظر عبارتنداز

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \qquad \text{و} \qquad \mathbf{J} = \frac{1}{\mathscr{V}} \frac{\hbar \mathbf{k}}{m} \qquad (۵۴ - ۸)$$

دامنه اول گذار در (۸–۵۲) به‌شکل زیر است

$$M_{\mathbf{kk}'}^{(1)} = \langle \mathbf{k}' | \hat{V} | \mathbf{k} \rangle = \frac{1}{\mathscr{V}} \int V(\mathbf{r}') e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}'} \, d\mathbf{r}'$$

$$= \frac{1}{\mathscr{V}} V(\mathbf{K} = \mathbf{k} - \mathbf{k}') \qquad (۵۵ - ۸)$$

چگالی حالتهای (با نادیده گرفتن اسپین) وابسته به‌این ویژه تابعها با استفاده از (۵–۱۶) که عبارت است از

$$d\mathbf{n} = \frac{\mathscr{V}}{(2\pi)^3} d\mathbf{k} = \rho(\mathbf{k})\, d\varepsilon$$

به‌دست‌می‌آید. با بیان این معادله در مختصات قطبی کروی و استفاده از (۸–۵۴)، خواهیم داشت

---

* فرض می‌شود که فرایند پراکندگی در یک جعبه بزرگ با حجم $\mathscr{V}$ اتفاق افتاده است (رک معادله ۵ – ۱۶).

$$\frac{\mathscr{V}}{(2\pi)^3}\, d\Omega_{\mathbf{k}}\, k^2\, dk = \rho(\mathbf{k})\, d\varepsilon = \rho(\mathbf{k})\, \frac{\hbar^2 k}{m}\, dk$$

یا

$$\rho(\mathbf{k}) = \frac{\mathscr{V}}{(2\pi)^3}\, \frac{mk}{\hbar^2}\, d\Omega_{\mathbf{k}} \qquad (۵۶-۸)$$

معادله (۸-۵۶) نمایشگر تعداد حالتهایی، بر واحد انرژی، است که بردار $\mathbf{k}$ ی آنها در زاویه حجمی $d\Omega_{\mathbf{k}}$ قرار دارد. تعداد کل ذراتی که در واحد زمان به‌این زاویه حجمی‌وارد می‌شوند، با استفاده از (۸-۵۱)، عبارتنداز

$$R_{\mathbf{kk}'} = dN_{\mathbf{kk}'} = \left[\frac{2\pi}{\hbar}\left|\sum_{j=1}^{\infty}\lambda^j M^{(j)}_{\mathbf{kk}'}\right|^2 \frac{\mathscr{V}}{(2\pi)^3}\,\frac{mk'}{\hbar^2}\, d\Omega_{\mathbf{k}'}\right]_{k=k'}$$

یا

$$dN_{\mathbf{kk}'} = \frac{\mathscr{V} mk}{(2\pi)^2\hbar^3}\left|\sum_{j=1}^{\infty}\lambda^j M^{(j)}_{\mathbf{kk}'}\right|^2_{k=k'} d\Omega_{\mathbf{k}'}$$

با تقسیم طرفین بر شار فرودی $J_{\text{inc}} = (1/\mathscr{V})(\hbar k/m)$ ، بالاخره مقطع موثر خواهدشد

$$\sigma = \frac{1}{J_{\text{inc}}}\,\frac{dN_{\mathbf{kk}'}}{d\Omega_{\mathbf{k}'}} = \frac{\mathscr{V}^2 m^2}{(2\pi\hbar^2)^2}\left|\sum_{j=1}^{\infty}\lambda^j M^{(j)}_{\mathbf{kk}'}\right|^2_{k=k'} \qquad (۵۷-۸)$$

در نگاه اول عجیب به‌نظر می‌رسد که چرا حجم جعبه به‌کار برده شده در بهنجارش $\psi_{\mathbf{k}}$ باید در مقطع موثر وارد شود. اما، هرجمله شامل $M^{(j)}$ حاوی یک ضریب مناسبی است که هر نوع بستگی ممکن σ به‌حجم را حذف می‌کند.

اگر λ کوچک باشد، تنها نیاز به‌نگاهداری دامنه اول

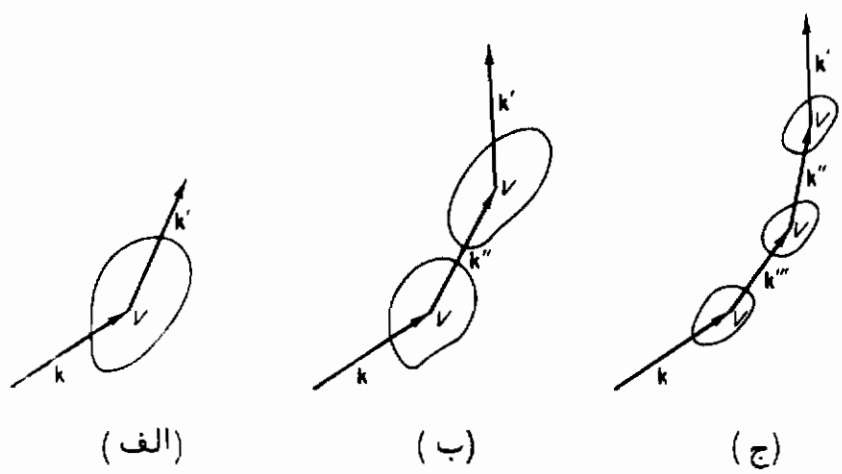
$$M^{(1)}_{\mathbf{kk}'} = \frac{1}{\mathscr{V}}\, V(\mathbf{k})$$

داریم و مقطع موثر مرتبه اول خواهد شد

$$\begin{aligned}\sigma^{(1)} &= \frac{\mathscr{V}^2 m^2}{(2\pi\hbar^2)^2}\left|\frac{\lambda}{\mathscr{V}}\, V(\mathbf{K})\right|^2 \\ &= \left(\frac{\lambda m}{2\pi\hbar^2}\right)^2 |V(\mathbf{K})|^2\end{aligned} \qquad (۵۸-۸)$$

نتیجه مرتبه اول با تقریب اول بورن (۸–۲۹) یکسان است. در واقع، می‌توان [illegible] کرد (رک مسئله ۸–۱۰) که دامنه‌های بالاتر نیز جمله به جمله با جمله‌های سری بورن [illegible] می‌کنند.

گفته می‌شود که هر دامنه گذار در (۸–۵۷) یک *فرایند* را نشان می‌دهد. در مورد پراکندگی از یک پتانسیل ثابت، می‌توان به هر $M_{\mathbf{kk}'}^{(l)}$ در (۸–۵۷) یک نمودار نسبت داد. فرایند مرتبه اول شامل یک پیکان ورودی برای $\mathbf{k}$، یک رأس برای پتانسیل V و یک پیکان خروجی برای $\mathbf{k}'$ (شکل ۸–۸) است. فرایند مرتبه دوم شامل یک پیکان ورودی برای $\mathbf{k}$، یک راس برای V، یک پیکان واسط برای $\mathbf{k}''$، یک راس دیگر برای V و یک پیکان خروجی برای $\mathbf{k}'$ می‌باشد. این نوع نمودارها توسط فاینمن[4] معرفی شدند و از آن به‌بعد به‌همین نام نامیده می‌شوند. این نمودارها بخصوص در مسائل پیچیده‌تر وابسته به‌پراکندگی میدانهای کوانتومی‌که درآن پراکندگی چندذره‌ای صورت می‌گیرد مفید هستند. به‌تناظر بین انتگرالهای مربوط به $M_{\mathbf{kk}'}^{(l)}$ در (۸–۵۲) و نمودارهای فاینمن در شکل (۸–۸) توجه کنیم. در فصل ۱۲ فرصت خواهیم یافت‌که قاعده طلائی فرمی‌را در بحث الکترودینامیک کوانتومی به‌کار بریم.



شکل (۸–۸) نمودارهای فاینمن برای پراکندگی از یک پتانسیل ثابت در (الف) مرتبه اول، (ب) مرتبه دوم و (ج) مرتبه سوم.

۱۱ – پراکندگی ناکشسان و جذب

در مسائل پراکندگی که تا اینجا بررسی کرده‌ایم، پتانسیل ایستای هدف ثابت یک نقش غیرفعال بازی می‌کرد. در نتیجه، دو اصل پایستگی زیر در مقطع موثر منعکس شدند.

(۱) *پایستگی انرژی*، یعنی، باریکه‌های فرودی و پراکنده شده دارای انرژیهای برابر

4- R.P. Feynman

بودند (پراکندگی کشسان).

(۲) *پایستگی ذرات*، یعنی، به‌تعداد ذرات منحرف شده از باریکه فرودی در باریکه پراکنده شده ظاهر شدند (قضیه اپتیکی).

در موارد زیادی، هدف نقش فعالی در فرایند پراکندگی بازی می‌کند. به‌عنوان‌مثال، در فرایند واقعی پراکندگی راترفورد، هسته‌های پس زده طلا ناقل هم انرژی و هم تکانه هستند. ذرات پراکنده شده α در اثر برخورد لزوما" مقداری انرژی از دست می‌دهند. انرژی کل (پرتابه + هدف) در این وضعیت پایسته می‌ماند. در پراکندگی الکترونها از اتمها، پرتابه‌ها ممکن است با برانگیختن داخلی هدفها انرژی از دست بدهند. بنابراین پرتابه‌ها ممکن است به‌طور ناکشسان پراکنده شوند. در فرایندهای پراکندگی دیگر، ممکن است پرتابه به‌وسیله هدف ربوده یا جذب شود. این پدیده در واکنشهای هسته‌ای کاملا" عادی است. بنابراین هدف قادر است ذرات را حذف کند؛ تعداد ذرات حذف شده از باریکه فرودی نیازی ندارند که در باریکه پراکنده شده ظاهر شوند.

گفته می‌شود که هر مد پراکندگی (کشسان، ناکشسان، جذب) یک "کانال" نمایش می‌دهد و هرکدام مقطع موثری دارد که می‌تواند با استفاده از قاعده طلائی فرمی محاسبه شود. اما در چنین محاسبه‌ای طبیعت دقیق پراکننده باید گنجانیده شده باشد. به‌طور کلی، تجزیه و تحلیل فرایندهای پراکندگی مستلزم درک مسئله چند جسمی است.

در فصلهای ۹ و ۱۰ مکانیک کوانتومی مسئله چندجسمی را آنگونه که به‌حالتهای مقید و پراکندگی مربوط است، بحث خواهیم کرد.

مسائل

۸ـ۱ (الف) با استفاده از مکانیک کلاسیکی، یک عبارت عمومی برای مسیر هذلولی‌شکل ذره‌ای که به‌وسیله پتانسیل $V = ZZ'e^2/r$ از مبداء دفع می‌شود به‌دست آورید.

(ب) نشان دهید که رابطه بین پارامتر برخورد b و زاویه پراکندگی θ عبارت است از

$$b = \left(\frac{ZZ'e^2}{2\varepsilon}\right)\cot\frac{\theta}{2}$$

(ج) با استفاده از (۸ـ۳) نشان دهید که مقطع موثر راترفورد به‌وسیله

$$\sigma(\theta) = \left(\frac{ZZ'e^2}{4\varepsilon}\right)^2 \sin^{-4}\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

داده می‌شود .

۸ــ۲ (الف) با استفاده از مکانیک کلاسیکی ، رابطه $b = b(\theta)$ را برای یک پتانسیل کروی غیرقابل نفوذ $V = \infty$ برای $r \leqslant R$ و $V = 0$ برای جاهای دیگر ، به‌دست آورید .

(ب) مقطع موثر دیفرانسیلی را برای این پتانسیل به‌دست آورید .

(ج) نتیجه (ب) را انتگرال‌گیری کنید و مقطع موثر کل را به‌دست آورید (توجه کنید که مقطع موثر مستقل از ε است) .

۸ــ۳ عباراتی برای ضرایب متریک ، لاپلاسی و عنصر حجم در مختصات سهموی به‌دست آورید .

۸ــ۴ (الف) مقطع موثر دیفرانسیلی کلاسیکی را برای یک پتانسیل سخت ــ کره $V = -V_0$ برای $r \leqslant R$ و $V = 0$ در جاهای دیگر ، محاسبه کنید .

(ب) مقطع موثر کوانتومی در تقریب بورن کدام است ؟

(ج) مقطع موثر کوانتومی را با استفاده از تحلیل موج جزئی ، شامل موجهای s و p به‌دست آورید .

۸ــ۵ (الف) با استفاده از مکانیک کلاسیکی ، نشان دهید که رابطه بین پارامتر برخورد و زاویه پراکندگی برای یک پتانسیل $V = K/r^2$ عبارت است از

$$b^2 = \frac{K}{\varepsilon}\frac{1}{\theta}\frac{(\pi-\theta)^2}{(2\pi-\theta)}$$

که در آن ε انرژی پرتابه‌ها است .

(ب) مقطع موثر کلاسیکی را برای این پتانسیل محاسبه کنید .

(ج) مقطع موثر کوانتومی را برای یک پتانسیل $1/r^2$ در تقریب‌بورن پیدا کنید .

۸ــ۶ نشان دهید که تابع‌گرین

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}$$

دارای خاصیت زیر است

$$(\nabla^2 + k^2)G(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$$

۸ــ۷ (الف) نشان دهید که دامنه دوم بورن با رابطه

$$f^{(2)} = \left(\frac{2m\lambda}{\hbar^2}\right)^2 \frac{1}{4\pi}\frac{1}{(2\pi)^3}\int \frac{V(\mathbf{k}-\mathbf{k}'')V(\mathbf{k}''-\mathbf{k}')\,d\mathbf{k}''}{(k''^2-k^2)}$$

داده می‌شود .

(ب) عبارت مقطع موثر در تقریب دوم بورن چیست ؟

۸ــ۸ شکل عمومی بستگی زاویه‌ای مقطع موثر را وقتی موج جزئی $l = 2$ در نظر گرفته‌می‌شود بیان کنید .

۸ــ۹ (الف) نشان دهید که برای انرژیهای پائین $(k \to 0)$ جابه‌جایی فاز s ــ موج برای یک پتانسیل سخت ــ کره ($V = V_0$ برای $r \leqslant R$) ، از (۸ــ۴۹) به‌صورت

$$\delta_0 \simeq kR\left[\frac{\tanh[k_0 R]}{k_0 R} - 1\right] \qquad , \qquad k_0 = \left(\frac{2mV_0}{\hbar^2}\right)^{1/2}$$

به‌دست می‌آید .

(ب) نشان دهید که مقطع موثر کل s ــ موج عبارت است از

$$\sigma_0 \simeq 4\pi R^2\left[\frac{\tanh[k_0 R]}{k_0 R} - 1\right]^2$$

(ج) این عبارت وقتی $V_0 \to \infty$ به‌چه صورتی در خواهد آمد ؟

۸ــ۱۰ نشان دهیدکه دوجمله اول در (۸ــ۵۷) همان نتایج دوجمله اول در (۸ــ۲۴) (تقریب دوم بورن) را می‌دهد .

مراجع پیشنهادی

Bohm, D., "Quantum Theory," Chapter 21. Prentice-Hall, Englewood Cliff, New Jersey, 1951.

Landau, L. D., and Lifshitz, E. M., "Quantum Mechanics," 2nd ed., Chapter XVII. Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1965.

Marion, J. B., "Classical Dynamics of Particles and Systems," 2nd ed. Academic Press, New York, 1970.

Merzbacher, E., "Quantum Mechanics," 2nd ed., Chapter 21. New York, Wiley, 1970.

Newton, R., "Scattering Theory of Waves and Particles." McGraw-Hill, New York, 1966. (This advanced text is devoted entirely to scattering phenomena. It is aimed at the more advanced student and considerable mathematical background is required on the part of the student.)

Rodberg, L. S., and Thaler, R. M., "Introduction to the Quantum Theory of Scattering." Academic Press, New York, 1967. (This text on scattering is somewhat more introductory and less specialized in its discussions of quantum mechanics than is R. Newton's book above.)

قسمت دوم

سیستمهای چند ذره‌ای

۹

ذرات بدون برهم کنش

سیستمهای چندذره‌ای اهمیت و فایده زیادی هم در مکانیک کلاسیکی و هم درمکانیک کوانتومی‌دارند .حتی هیدرژن ،که ساده‌ترین اتمهاست ،از دوذره تشکیل شده است، پروتون و الکترون . بیشتر مسائل فیزیک اتمی و هسته‌ای شامل تعداد متوسطی($2 \leqslant N \lesssim 100$) ازذرات می‌باشند . در فیزیک جامدات ، مایعات و گازها ، وضعیت در حقیقت یک مسئله چند جسمی است ($N \sim ۱۰^{۲۳}$) . قبل از فرمولبندی نظریه کوانتومی ، به‌طور اختصار بعضی از مفاهیم کلاسیکی سیستمهای چندذره‌ای را مورد بحث قرار خواهیم داد .

۱ ــ مکانیک کلاسیکی

یک سیستم مرکب از N ذره‌نقطه‌ای از نظر سینماتیکی به‌وسیله مجموعه‌ای از N بردار مکانی ، که در آن $\mathbf{r}^{(q)}$ مکان ذره q ام را مشخص می‌کند($q = 1, \ldots, N$)نمایش داده می‌شود . وقتی‌که بستگی زمانی هریک از این بردارها (با توجه به‌شرایط اولیه داده شده) مشخص شده باشد ، مسئله مکانیکی حل شده تلقی می‌شود .

مطلب‌را با ساختن‌لاگرانژی $\mathscr{L} = T - V$ برحسب N ۳ مختصات دکارتی و سرعتها ، $x_i^{(q)}$ و $\dot{x}_i^{(q)}$،($i = 1, \ldots, 3, q = 1, \ldots, N$) شروع می‌کنیم که در آن انرژی جنبشی عبارت است از

$$T = \sum_{q=1}^{N} \tfrac{1}{2} m_q |\dot{\mathbf{r}}^{(q)}|^2 = \sum_{q=1}^{N} \sum_{i=1}^{3} \tfrac{1}{2} m_q \dot{x}_i^{(q)2}$$

$$= \sum_{q=1}^{N} \tfrac{1}{2} m_q (\dot{x}^{(q)2} + \dot{y}^{(q)2} + \dot{z}^{(q)2}) \qquad (۱-۹)$$

انرژی پتانسیل به‌صورت زیر تجزیه خواهد شد*

$$V = \sum_{q}^{N} V_q + \frac{1}{2} \sum_{q}^{N} \sum_{q \neq t}^{N} V_{qt}$$

که در آن V_q انرژی پتانسیل ذره q ام ناشی‌از نیروهای خارجی است و V_{qt} نمایانگر انرژی برهم‌کنش بین ذرات q ام و t ام می‌باشد. فرض خواهیم کرد که V_{qt} مستقل‌از سرعت‌است و در قانون سوم نیوتن، یعنی $V_{qt} = V_{tq}$، صدق می‌کند. در موارد زیادی V_{qt} فقط تابعی‌از فاصله بین دو ذره است.

با اعمال معادلات لاگرانژ (۲ـ۲۶) به (۹ـ۱)، تعداد $3N$ معادله دیفرانسیل برای $x_i^{(q)}$ به‌صورت

$$m_q \ddot{x}_i^{(q)} + \frac{\partial V_q}{\partial x_i^{(q)}} + \frac{\partial}{\partial x_i^{(q)}} \sum_{t \neq q}^{N} V_{qt} = 0 \qquad (i = 1, 2, 3, \quad q = 1, \ldots, N)$$

یا به‌شکل برداری

$$m_q \ddot{\mathbf{r}}^{(q)} + \nabla^{(q)} V(\mathbf{r}^{(q)}) + \nabla^{(q)} \sum_{t \neq q}^{N} V(\mathbf{r}^{(q)} - \mathbf{r}^{(t)}) = 0 \qquad (q = 1, \ldots, N) \qquad (۹ - ۲)$$

به‌دست می‌آید.

معادلات (۹ـ۲) باید برای $\mathbf{r}^{(q)}(t)$، با در نظر گرفتن شرایط اولیه $\mathbf{r}^{(q)}(0) = \mathbf{r}_0^{(q)}$ و $\dot{\mathbf{r}}^{(q)}(0) = \mathbf{v}_0^{(q)}$، حل شوند. اشکال در حل (۹ـ۲۰)، حتی برای تعداد نسبتاً کمی از ذرات، از این واقعیت ناشی می‌شود که این معادلات جفت شده هستند، یعنی، معادله q ام شامل $\mathbf{r}^{(t)}$ است. توجه کنیم که این جفت‌شدگی از انرژی پتانسیل برهم‌کنش سرچشمه می‌گیرد نه از نیروهای خارجی که روی هر ذره به‌طور انفرادی عمل می‌کنند. متاسفانه‌هیچ روش عمومی وجود ندارد که دستگاه معادلات (۹ـ۲) را تفکیک و آنرا قابل حل کند. برای برهم‌کنشهای بسیار خاصی، گاهی اوقات می‌توان معادلات حرکت را، با تبدیل به‌مجموعه

---

* جمله برهم‌کنش $q = t$ حذف شده است زیرا یک ذره نمی‌تواند روی خودش نیرو وارد کند. ضریب $\frac{1}{2}$ برای جبران دوبارشمردن وارد شده است. بعضی از مولفین از نمادگذاری

$$\frac{1}{2} \sum_{q} \sum_{q \neq t} V_{qt} = \sum_{q} \sum_{t < q} V_{qt}$$

که در آن دوباره‌شماری صورت نمی‌گیرد استفاده می‌کنند.

دیگری‌ازمختصات بندادی، تفکیک کرد. به‌عبارت دیگر، وقتی فقط دو ذره برهم‌کنش‌کننده، بدون هیچ نوع نیروی خارجی، داریم معادلات [illegible] می‌توانند با استفاده‌ازتبدیل به مرکز جرم‌تفکیک شوند. متاسفانه این روش نمی‌تواند [illegible] سه ذره تعمیم داده شود. در مورد خاصی که N ذره توسط نیروهای کشسان با یکدیگر برهم‌کنش می‌کنند (یعنی، وقتی انرژی پتانسیل به‌شکل یک عبارت درجه دوم از مختصات است) تبدیل دیگری *(تبدیل به‌مختصات بهنجار)* وجود داردکه مسئله‌را قابل‌حل می‌کند*. در فصل ۱۵ به‌این مسئله بازخواهیم‌گشت.

وقتی معادلات حرکت جفت‌شده هستند، گفته می‌شود که حرکات ذرات *ازنظر دینامیکی همبسته‌اند*. در این صورت حرکت هرذره روی [illegible] تمام ذرات دیگر تاثیر می‌گذارد. در موارد نسبتاً نادری که برهم‌کنشها صرفنظر کردنی هستند یا شاید وجود ندارند، معادلات حرکت، علی‌الاصول، تفکیک می‌شوند ومسئله [illegible] به‌مسئله‌ای که شامل N مسئله یک جسمی‌است تقلیل‌می‌یابد. حرکت یک سیستم "ایده‌آل" به‌عنوان مثال، گاز ایده‌آل، ازنظر دینامیکی ناهمبسته است و هرذره طوری حرکت می‌کند که گوئی ذرات دیگر وجود ندارند. بنابراین می‌توانیم نتیجه بگیریم‌که ازنظر کلاسیکی مسئله N جسمی "ایده‌آل" یا بدون برهم کنش دیگر مشکل‌تراز هیچ یک از مسائل یک جسمی اجسام تشکیل‌دهنده آن نخواهد بود. درعمل، وقتی فاصله متوسط ذرات خیلی بزرگتراز برد پتانسیل برهم‌کنش باشد، سیستم‌تقریباً ایده‌آل می‌شود. به‌این دلیل است که گازهای کلاسیکی با نیروهای بین مولکولی کوتاه برد، وقتی به‌اندازه کافی رقیق باشند رفتار گاز ایده‌آل از خود نشان می‌دهند.

مسئله مکانیک کوانتومی چندجسمی مشکلات زیادی با همتای کلاسیکی خوددارد. حل مسئله‌کوانتومی مستلزم‌حل معادله شرودینگر چندجسمی (جفت‌شده) است. تفکیک‌این‌معادله مشکلاتی شبیه به‌آنچه که در معادلات لاگرانژ کلاسیکی پیش‌آمد پیش می‌آورد. در مورد یک سیستم *ایده‌آل* (بدون برهم‌کنش) تفکیک ساده و سرراست است. با این وجود، یک تفاوت فاحش بین سیستمهای ایده‌آل‌کلاسیکی‌و کوانتومی وجود دارد. این مسئله وقتی رخ می‌دهد که ذرات از یکدیگر تمیزناپذیر باشند. در مورد کوانتومی، حرکات ذرات هنوز همبسته‌اند، یعنی، ذرات روی یکدیگر تأثیر می‌گذارند هرچند هیچ نیروئی بین آنها وجود ندارد. این همبستگی‌ها، آماری (درمقابل دینامیکی) نامیده می‌شوند وهیچ مشابهی‌درگستره‌کلاسیکی ندارند. این همبستگی‌ها عموماً برای بوزون‌ها (ذرات با اسپین درست) جاذبه و برای

---

* به‌عنوان مثال به‌کتاب زیر مراجعه کنید.

H. Goldstein, "Classical Mechanics." Addison-wesley, Reading Massachusetts, 1950.

فرمیون‌ها (ذرات با اسپین نیمه‌درست) دافعه‌اند . به‌علت این همبستگی‌ها ، گفته می‌شودکه اولیها ازآمار بوز ــ اینشتین پیروی می‌کنند در حالی که آخری‌ها ازآمار فرمی ــ دیــراک پیروی می‌کنند (رک بخش ۱۱) . ذرات کلاسیکی همیشه ازآمار ماکسول ــ بولتزمن پیــروی می‌کنند . به‌زودی به‌این مسائل باز خواهیم گشت .

همان‌طور کــه قبلا" دیده‌ایم ، عبور به‌نظریه کوانتومی مستلزم صورتبندی هامیلتونــی است .هامیلتونی در این مورد درست عبارت است از انرژی کل که برحسب $\mathbf{p}^{(q)}$ و $\mathbf{r}^{(q)}$ بیــان شده باشد ، یعنی

$$\mathscr{H} = \sum_{q=1}^{N} \frac{|\mathbf{p}^{(q)}|^2}{2m_q} + \sum_{q=1}^{N} V(\mathbf{r}^{(q)}) + \tfrac{1}{2}\sum_{q}^{N}\sum_{t\neq q}^{N} V(\mathbf{r}^{(q)} - \mathbf{r}^{(t)}) \qquad (۹-۳)$$

N ۶ معادله هامیلتونی حرکت عبارتنداز

$$-\frac{\partial \mathscr{H}}{\partial x_i^{(q)}} = \dot{p}_i^{(q)}; \qquad \frac{\partial \mathscr{H}}{\partial p_i^{(q)}} = \dot{x}_i^{(q)} \qquad (۹-۴)$$

مشابه با (۲ــ۷۶) ، هر تابع بندادی از متغیرهای $x_i^{(q)}$ و $p_i^{(q)}$ در معادله حرکت

$$\frac{dA}{dt} = \{A, \mathscr{H}\} + \frac{\partial A}{\partial t} \qquad (۹-۵)$$

صدق می‌کند . کروشه پواسنی دو تابع بندادی عبارت است از

$$\{A, B\} = \sum_{q=1}^{N}\sum_{i=1}^{3}\left(\frac{\partial A}{\partial x_i^{(q)}}\frac{\partial B}{\partial p_i^{(q)}} - \frac{\partial B}{\partial x_i^{(q)}}\frac{\partial A}{\partial p_i^{(q)}}\right) \qquad (۹-۶)$$

روابط زیر برای کروشه‌های پواسنی‌به‌سادگی اثبات می‌شوند

$$\{x_i^{(q)}, x_j^{(t)}\} = \{p_i^{(q)}, p_j^{(t)}\} = 0$$

و

$$\{x_i^{(q)}, p_j^{(t)}\} = \delta_{ij}\delta_{qt} \qquad (۹-۷)$$

در واقع ، اگر A و B به‌ترتیب توابع بندادی وابسته به‌ذرات q ام و t ام باشند ، داریم

$$\{A^{(q)}, B^{(t)}\} = 0 \qquad (\text{برای } t \neq q)$$

۲ ــ گذار به‌مکانیک کوانتومی

مجموعه‌ای از N ذره که مختصات و تکانه‌های بندادی آنها $\mathbf{r}^{(q)}$ و $\mathbf{p}^{(q)}$ باشند در نظر بگیریم . سپس تناظرهای

$$\begin{aligned} \mathbf{r}^{(q)} &\to \hat{\mathbf{r}}^{(q)} \\ \mathbf{p}^{(q)} &\to \hat{\mathbf{p}}^{(q)} \end{aligned} \qquad (q = 1, \ldots, N)$$

و برای تابع بندادی ،

$$A(\mathbf{r}^{(1)}, \mathbf{p}^{(1)}, \ldots, \mathbf{r}^{(N)}, \mathbf{p}^{(N)}) \to \hat{A}(\hat{\mathbf{r}}^{(1)}, \hat{\mathbf{p}}^{(1)}, \ldots, \hat{\mathbf{r}}^{(N)}, \hat{\mathbf{p}}^{(N)})$$

را برقرار نمائیم . می‌خواهیم که تمام عملگرهائی که از نظر فیزیکی مشاهده‌پذیراند هرمیتی باشند . با استفاده از روابط کروشه پواسنی (۹ــ۷) ، روابط جابه‌جایی اساسی زیر را به‌دست می‌آوریم

$$[\hat{x}_i^{(q)}, \hat{x}_j^{(l)}] = [\hat{p}_i^{(q)}, \hat{p}_j^{(l)}] = 0$$

و

$$[\hat{x}_i^{(q)}, \hat{p}_j^{(l)}] = \delta_{ij}\delta_{ql}\,\hat{1}i\hbar \qquad (۹ - ۸)$$

توجه خود را به‌حالتهای مانا ، یعنی ، ویژه حالتهای انرژی سیستم چندجسمی معطوف می‌کنیم . این حالتها با کتهایی نمایانده می‌شوند که در

$$\mathscr{H}|E_\alpha\rangle = E_\alpha|E_\alpha\rangle \qquad (۹ - ۹)$$

صدق می‌کنند* . در این رابطه $\mathscr{H}$ هامیلتونی‌ای است که از (۹ــ۳) به‌دست‌آمده است .تاکید می‌کنیم که کت $|E_\alpha\rangle$ کل سیستم چندذره‌ای را مشخص می‌کند و نه یکی از ذرات تشکیل‌دهنده آنرا . همین‌طور ، E_α انرژی کوانتیده کل سیستم را بیان می‌کند . شاخص α مجموعه‌ای از $3N$ عدد کوانتومی را نشان می‌دهد زیرا به‌همین تعداد درجات آزادی وجود دارد . وقتی ذرات سیستم دارای یک اسپین ذاتی باشند ، هرکدام از آنها یک درجه آزادی داخلی به‌دست می‌آورند . بنابراین برای سیستمهای با اسپین ذاتی $4N$ عدد کوانتومی وجود دارد .

---

* برای مشخص کردن حالتهای چند ذره‌ای از حروف یونانی برای شاخصهای پائین استفاده خواهیم کرد .

۳ ــ نمایش مختصه‌ای و مکانیک موجی

در حالی که (۹ــ۹) رابطه‌ای را نشان می‌دهد که کاملاً مستقل از پایه است ، مناسب است که مشابه مکانیک موجی آن ، یعنی ، شکل آن در نمایش مختصه‌ای ، را به‌دست آوریم .

چون عملگرهای $\hat{\mathbf{r}}^{(q)}$ دوبه‌دو جابه‌جاپذیراند و ناتبهگن فرض می‌شوند ، باید یک ویژه کت مشترک وجود داشته باشد که دارای ویژگی زیر باشد

$$\hat{\mathbf{r}}^{(q)}|\mathbf{r}^{(1)}\cdots\mathbf{r}^{(q)}\cdots\mathbf{r}^{(N)}\rangle = \mathbf{r}^{(q)}|\mathbf{r}^{(1)}\cdots\mathbf{r}^{(q)}\cdots\mathbf{r}^{(N)}\rangle \qquad (q=1,\ldots,N) \qquad (۹-۱۰)$$

این کت معرف حالتی است که در آن ذره اول دقیقاً در $\mathbf{r}^{(1)}$ ، ذره دوم در $\mathbf{r}^{(2)}$ ، و . . . . قرار دارد . می‌توان این کت را به‌صورت یک حاصل ضرب مستقیم

$$\begin{aligned}|\mathbf{r}^{(1)}\cdots\mathbf{r}^{(q)}\cdots\mathbf{r}^{(N)}\rangle &= |\mathbf{r}^{(1)}\rangle\otimes\cdots|\mathbf{r}^{(q)}\rangle\otimes\cdots|\mathbf{r}^{(N)}\rangle\\ &= |\mathbf{r}^{(1)}\rangle\cdots|\mathbf{r}^{(q)}\rangle\cdots|\mathbf{r}^{(N)}\rangle\end{aligned}$$

همان‌طور که در مورد اسپین ذاتی درفصل ۶ انجام دادیم ، نمایش داد . عملگر $\hat{\mathbf{r}}^{(q)}$ فقط روی کت $|\mathbf{r}^{(q)}\rangle$ عمل می‌کند و برکتهای دیگر تاثیر نمی‌گذارد . چون این کتها قسمتی از یک طیف پیوسته را تشکیل می‌دهند ، دارای خاصیت آشکار راست‌هنجاری

$$\langle\mathbf{r}^{(1)\prime}\cdots\mathbf{r}^{(N)\prime}|\,\mathbf{r}^{(1)}\cdots\mathbf{r}^{(N)}\rangle = \delta(\mathbf{r}^{(1)\prime}-\mathbf{r}^{(1)})\cdots\delta(\mathbf{r}^{(N)\prime}-\mathbf{r}^{(N)})$$

می‌باشند . به‌علاوه ، این کتها یک پایه کامل تشکیل می‌دهند و هر کت حالت چند جسمی می‌تواند به‌صورت

$$|\beta\rangle = \int_N\cdots\int_1 d\mathbf{r}^{(1)}\cdots d\mathbf{r}^{(N)}\Psi_\beta(\mathbf{r}^{(1)}\cdots\mathbf{r}^{(N)})|\mathbf{r}^{(1)}\cdots\mathbf{r}^{(N)}\rangle \qquad (۹-۱۱)$$

بیان شود . " ضریب "

$$\Psi_\beta(\mathbf{r}^{(1)}\cdots\mathbf{r}^{(N)}) = \langle\mathbf{r}^{(1)}\cdots\mathbf{r}^{(N)}|\beta\rangle \qquad (۹-۱۲)$$

تابع حالت چندجسمی نامیده می‌شود . طبق اصول موضوع مکانیک کوانتومی ، کمیت

$$d\mathscr{P}_\beta = |\Psi_\beta|^2\, d\mathbf{r}_1\cdots d\mathbf{r}_N \qquad (۹-۱۳)$$

احتمال وجود ذره اول در یک حجم $d\mathbf{r}_1$ حول $\mathbf{r}_1$ ، ذره دوم در $d\mathbf{r}_2$ حول $\mathbf{r}_2$ ، و غیره ، را نشان می‌دهد . اگر حالت مقید باشد ، باید داشته باشیم

$$\lim_{\text{all } \mathbf{r}^{(q)} \to \infty} \Psi_{\beta}(\cdots)$$

بنابراین می‌توانیم یک حالت نرمیده را با استفاده از

$$\langle \beta | \beta \rangle = 1$$

یا

$$\int_{\infty} \cdots \int_{1} |\Psi_{\beta}|^2 \, d\mathbf{r}^{(1)} \cdots d\mathbf{r}^{(N)} = 1$$

بهنجارکنیم. برای حالتهای پیوسته، انتخاب طرحواره بهنجارش بستگی به‌مسئله خاص مورد نظر دارد. برای یک گاز ایده‌آل نامقید، معمولاً بهنجارش جعبه‌ای انجام می‌گیرد (رک بخش ۱۰).

از تعمیم استدلالی که در فصل ۴ برای سیستمهای یک ذره‌ای ارائه شد، بر می‌آید که عملگرهای چندذره‌ای در مکانیک موجی با جایگذاریهای

$$\hat{\mathbf{r}}^{(q)} \to \mathbf{r}^{(q)} \qquad \text{و} \qquad \hat{\mathbf{p}}^{(q)} \to \frac{\hbar}{i} \nabla^{(q)} \qquad (۹-۱۴)$$

به‌دست می‌آیند. عملگر گرادیان فقط روی مختصات $\mathbf{r}^{(q)}$ عمل می‌کند، در حالی که بقیه مختصات‌را به‌عنوان ثابت در نظر می‌گیرد. معادله ویژه مقداری انرژی چندذره‌ای شرودینگر (۹-۹) می‌تواند در مکانیک موجی به‌صورت

$$\hat{\mathscr{H}} \Psi_{\alpha} = E_{\alpha} \Psi_{\alpha} \qquad (۹-۱۵ \text{ الف})$$

نوشته شود که در آن

$$\hat{\mathscr{H}} = \sum_{q=1}^{N} -\frac{\hbar^2}{2m_q} \nabla^{(q)2} + \sum_{q=1}^{N} V(\mathbf{r}^{(q)}) + \frac{1}{2} \sum_{q}^{N} \sum_{i \neq q}^{N} V(\mathbf{r}^{(q)} - \mathbf{r}^{(i)}) \qquad (۹-۱۵ \text{ ب})$$

معادله (۹-۱۵) یک معادله دیفرانسیل با مشتقات جزئی برای ویژه تابعهای انرژی‌چندذره‌ای $\Psi_{\alpha}(\mathbf{r}^{(1)} \cdots \mathbf{r}^{(N)})$ و ویژه‌مقدارهای E_{α} است. عموماً نمی‌توان (۹-۱۵) را به‌معادلات‌یک‌جسمی تفکیک‌کرد. اشکال در حل این معادله از جملات برهم‌کنش دوجسمی ناشی می‌شود. خواهیم دید که وقتی این جملات غایب باشند (۹-۱۵) به‌طور خیلی ساده به N معادله ویژه‌مقداری انرژی شرودینگر یک ذره‌ای تفکیک می‌شود.

وقتی طیف و ویژه حالتها تعیین شدند، مقادیر قابل انتظار عملگرهای چندذره‌ای می‌توانند به‌طریق معمولی محاسبه شوند، یعنی،

$$\langle A\rangle_\alpha = \langle E_\alpha|\hat{A}(\hat{\mathbf{r}}^{(1)}, \hat{\mathbf{p}}^{(1)}, \cdots \hat{\mathbf{r}}^{(N)}, \hat{\mathbf{p}}^{(N)}|E_\alpha\rangle$$
$$= \int \Psi_\alpha^*(\mathbf{r}^{(1)} \cdots \mathbf{r}^{(N)})\,\hat{A}\left(\mathbf{r}^{(1)}, \frac{\hbar}{i}\nabla^{(1)} \cdots \mathbf{r}^{(N)}, \frac{\hbar}{i}\nabla^{(N)}\right)$$
$$\times\ \Psi_\alpha(\mathbf{r}^{(1)} \cdots \mathbf{r}^{(N)})\, d\mathbf{r}^{(1)} \cdots d\mathbf{r}^{(N)} \qquad (۱۶-۹)$$

مقادیر قابل انتظار $\langle A\rangle_\alpha$ و همین‌طور ویژه مقدارهای انرژی E_α به‌کل سیستم اشاره دارند نه به‌ذرات تشکیل دهندهٔ آن.

۴ ــ عملگر جایگشت

گرچه حل دقیق (۹ــ۱۵) معمولا" غیرممکن است، با این وجود ممکن است خواص گوناگونی‌از ویژه‌حالتها را با اعمال اصول تقارن نتیجه گرفت. عملگرهای چندجسمی عموما" شامل شاخصهایی وابسته به‌هرکدام از ذرات هستند. بنابراین بررسی رفتار فیزیکی سیستم دراثر جایگشت این شاخصها جالب خواهد بود. عملگر هرمیتی *جایگشت** $\hat{P}^{(qt)}$ راباخاصیت

$$\hat{P}^{(qt)}\hat{A}(1, 2, \ldots, q, \ldots, t, \ldots, N) = \hat{A}(1, 2, \ldots, t, \ldots, q, \ldots, N)\hat{P}^{(qt)}$$
$$(t, q = 1, \ldots, N;\quad t \neq q) \qquad (۱۷-۹)$$

که در آن $\hat{A}$ یک عملگر دلخواه چندجسمی است، وارد می‌کنیم. بردن عملگر جایگشت‌ازطرف چپ به‌طرف راست $\hat{A}$ به‌عوض‌شدن شاخصهای q و t منجر می‌شود.

چون دوعمل متوالی‌عملگر جایگشت باید هرعملگر را ناوردا باقی‌بگذارد، انتظار داریم که $[\hat{P}^{(qt)}]^2 = \hat{1}$، در نتیجه ویژه مقدارهای $\hat{P}^{(qt)}$ عبارتنداز ± 1. ازاین‌نظر، عملگرجایگشت شبیه عملگر پاریته است. اصطلاحا" گفته می‌شود که ویژه تابعهای $\hat{P}^{(qt)}$ دارای *تقارن معینی* (به‌جای پاریته معین) هستند. به‌آنهایی که متناظر با ویژه مقدار $+1$ هستند می‌گوئیم‌که *از نظر جایگشت متقارن‌اند* و دارای خاصیت زیر هستند

$$\Psi^S(1, \ldots, q, \ldots, t, \ldots, N) = \Psi^S(1, \ldots, t, \ldots, q, \ldots, N)$$
$$(t, q = 1, \ldots, N) \qquad (۱۸\text{ــ}۹\ \text{الف})$$

ویژه تابعهای وابسته به‌ویژه مقدار ۱ــ*پاد متقارن‌اند* و دارای خاصیت زیر می‌باشند

---

۱ این عملگر گاهی عملگرتعویض نامیده می‌شود.

$$\Psi^{A}(1, \ldots, q, \ldots, t, \ldots, N) = -\Psi^{A}(1, \ldots, t, \ldots, q, \ldots, N) \qquad (۹-۱۸ \text{ ب})$$

توجه کنیم که در هر حالت با تقارن معین، چگالی احتمال $|\Psi|^2$ همیشه نسبت به‌تعویض شاخصها ناورداست. به‌طور معادل، در چنین حالتهایی، ذرات *کاملا*" تمیزناپذیرند.

اگر عملگری نسبت به‌جایگشت‌ها متقارن باشد، داریم

$$\begin{aligned}\hat{P}^{(qt)}\hat{A}(1, \ldots, q, \ldots, t, \ldots, N) &= \hat{A}(1, \ldots, t, \ldots, q, \ldots, N)\hat{P}^{(qt)} \\ &= \hat{A}(1, \ldots, q, \ldots, t, \ldots, N)\hat{P}^{(qt)} \\ &\qquad (q, t = 1, \ldots, N)\end{aligned}$$

یا

$$[\hat{A}, \hat{P}^{(qt)}] = 0 \qquad (۹-۱۹)$$

بنابراین هر عملگر متقارن (نسبت به‌جایگشت) همیشه با عملگر جایگشت جابه‌جاپذیر است. اما توجه کنیم که عملگرهای جایگشت عموما" بین خودشان جابه‌جاپذیر نیستند. به‌عنوان مثال تابع سه‌ذره‌ای

$$\Psi(x_1, x_2, x_3) = \frac{x_1 x_2}{x_3}$$

را در نظر بگیریم. توجه کنیم که دو عمل جایگشت

$$\hat{P}_{12}\hat{P}_{23}\Psi = \frac{x_2 x_3}{x_1}, \qquad \hat{P}_{23}\hat{P}_{12}\Psi = \frac{x_3 x_1}{x_2}$$

معادل نیستند، بنابراین $\hat{P}_{12}$ و $\hat{P}_{23}$ عموما" جابه‌جاپذیرنیستند. خوشبختانه‌شواهد نشان می‌دهد که طبیعت چیزها را طوری مرتب کرده است که برای ذرات تمیزناپذیر، تنها حالتهائی که از نظر فیزیکی تحقق‌پذیراند به‌وسیله تابع حالتهایی‌که نسبت به‌جایگشت‌دارای تقارن معینی هستند نمایش داده می‌شوند. می‌توان نشان داد که برای هر عملگرمتقارن ساختن مجموعه‌ای از ویژه تابعهای با تقارن معین و از نظر فیزیکی کامل، به‌منظور بسط یک تابع حالت فیزیکی دلخواه وابسته به‌مجموعه ذراتی‌که از نظرمکانیک‌کوانتومی‌تمیزناپذیراند امکان‌پذیر است. تاکید می‌کنیم که این‌تقارن (یا پاد تقارن) همیشه نسبت به‌تعویض هم اسپین و هم‌مختصات فضائی هرزوج از ذرات در نظر گرفته می‌شود. بنابراین قوانین طبیعت اعتبار قضیه ۶ (از فصل ۳) را محفوظ نگاه می‌دارد. در نتیجه می‌توان فرض کرد که

برای هرهامیلتونی متقارن وابسته به‌ذرات تمیزناپذیر مجموعه کاملی از ویژه تابعهای انرژی با تقارن معین وجود دارد . از طرف دیگر ،اگر عملگر متقارن نباشد ، هیچکدام از ویژه حالتهای آن نمی‌توانند تقارن معینی داشته باشند (قضیه ۴) .

اگر هامیلتونی یک سیستم نسبت به‌جایگشت متقارن نباشد ، ذرات مسلما" متفاوت و تمیزپذیرند . از بحث فوق ، ویژه حالتهای انرژی نمی‌توانند دارای تقارن معینی باشند . از طرف دیگر ، اگر ذرات تمیزناپذیر باشند هامیلتونی و تمام عملگرهای مشاهده‌پذیر وابسته باید نسبت به‌جایگشت متقارن باشند ،وبراساس موافقت با طبیعت لازم است‌که ویژه‌حالتهای انرژی (و همین‌طور تمام تابع حالتهای دیگر)نسبت به‌جایگشت دارای تقارن معینی باشند (یعنی ، یا متقارن باشند یا پاد متقارن) . آزمایشها نشان داده‌اند که حالت بخصوص‌تقارن به‌اسپین ذاتی ذرات تمیزناپذیر مربوط است . تناظر به‌وسیله اصول موضوع زیر برقرارمی‌شود.

اصل موضوع (الف) ذرات با اسپین صحیح بوزون نامیده‌می‌شوند .تمام تابع حالتهای سیستمهای بوزونهای تمیزناپذیر کاملا" متقارن‌اندودارای‌خاصیت

$$\Psi^S(1, 2, \ldots, t, \ldots, q, \ldots, N) = +\Psi^S(1, 2, \ldots, q, \ldots, t, \ldots, N)$$

(۹ــ۲۰ الف) (بوزونها)

می‌باشند.

اصل موضوع (ب) ذرات با اسپین نیمه صحیح فرمیون نامیده می‌شوند . تمام تابع حالتهای فرمیونهای‌تمیزناپذیرکاملا" پاد متقارن‌اند ودارای خاصیت

$$\Psi^A(1, 2, \ldots, t, \ldots, q, \ldots, N) = -\Psi^A(1, 2, \ldots, q, \ldots, t, \ldots, N)$$

(۹ــ۲۰ ب) (فرمیونها)

می‌باشند .

شرایط تقارن برای بوزونها و فرمیونهای تمیزناپذیر منجر به‌آثاری می‌شوند که حتی‌در رفتارترمودینامیکی‌ماکروسکوپیکی‌شان مشهوداست . برای فرمیونها ، توجه کنیم که وقتی‌قرار می‌دهیم $\mathbf{r}^{(q)} = \mathbf{r}^{(t)} = \mathbf{R}$ ، (۹ــ۲۰ ب) خواهد شد

$$\Psi^A(1, 2, \mathbf{R}, \ldots, \mathbf{R}, \ldots, N) = -\Psi^A(1, 2, \mathbf{R}, \ldots, \mathbf{R}, \ldots, N)$$

اما ،چون فقط تابعی که متحد با صفر است می‌تواند برابر با منفی خود باشد ، نتیجه‌می‌شود که

$$\Psi^A(1, 2, \ldots, \mathbf{R}, \mathbf{R}, \ldots, N) = 0$$

بدین‌ترتیب برای فرمیونها به‌اصل زیر خواهیم رسید :

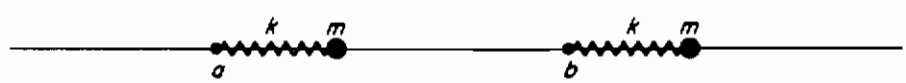
اصل طرد پاولی (شکل عمومی) : احتمال یافتن دو فرمیون تمیزناپذیر در یک نقطه از فضا صفر است*.

اصل پاولی می‌رساند که اگر یک فرمیون در نقطه بخصوصی قرار داشته باشد، تمام فرمیونهای دیگر با همان حالت اسپینی را از آن نقطه طرد می‌کند. *این دفع آماری صرفا" مکانیک کوانتومی است و کاملا" مستقل از نیروهای دینامیکی بین دو ذره است*. این دفع از طبیعت تمیزناپذیری دو ذره نشأت می‌گیرد.

بوزونهای در یک حالت اسپینی اثر کاملا" متضادی روی یکدیگر دارند. برهم‌کنشهای آماری آنها منجر به‌جاذبه‌هایی می‌شود که خوشه‌ای‌شدن ذرات را تقویت می‌کند. این اثر را در بخش ۷ نشان خواهیم داد.

باید خاطرنشان کرد که تمام ذرات یکسان تمیزناپذیرنیستند. به‌عنوان مثال، دوجرم مشابه بدون برهم‌کنش را درنظر بگیریم‌که توسط فنرهائی به‌نقاط a و b در روی محور x ها (شکل ۹ــ۱) مقید شده‌اند. هامیلتونی یک بعدی برای این سیستم عبارت است از

$$\mathscr{H} = \frac{\hat{p}^{(1)2}}{2m} + \frac{\hat{p}^{(2)2}}{2m} + \frac{1}{2}k[(x^{(1)} - a)^2 + (x^{(2)} - b)^2]$$



شکل (۹ــ۱) دوسیستم مشابه ولی تمیزپذیر

با اینکه ذرات خودشان یکسانند، واقعیت بسته‌بودن آنها به‌نقاط مختلف درفضا ناوردائی $\mathscr{H}$ نسبت به‌جایگشت (۲ ↔ ۱) را از بین می‌برد. این ذرات نمی‌توانند به‌عنوان ذرات تمیزناپذیر در نظر گرفته شوند.

تاکید می‌کنیم که برای اینکه دو ذره تمیزناپذیر باشند لازم است که *تمام* عملگرهای متناظربا مشاهده‌پذیرهایی‌که ازنظرفیزیکی قابل اندازه‌گیری هستند نسبت به‌جایگشت متقارن باشند. به‌عنوان مثال، یک اتم پوزیترونیوم بسیار شبیه به‌اتم هیدرژن است با این‌تفاوت که پروتون به‌وسیله پوزیترون، که جرم آن مساوی با جرم الکترون ولی بار آن مخالف بار

---

* این اثر طرد به‌فرمیونهای با مختصات اسپینی یکسان، یعنی مقادیر m_s یکسان، اعمال می‌شود.

الکترون است ، جایگزین شده است . هامیلتونی الکتروستاتیکی برای یک اتم پوزیترونیوم منفرد عبارت است از

$$\mathscr{H} = \frac{\hat{p}^{(1)2}}{2m} + \frac{\hat{p}^{(2)2}}{2m} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(1)} - \mathbf{r}^{(2)}|}$$

که در آن ۱ و ۲ به‌ترتیب اشاره به‌پوزیترون و الکترون دارند . با اینکه این هامیلتونی نسبت به‌جایگشت متقارن است ، دو ذره حقیقتا" تمیزناپذیر نیستند . این مطلب می‌تواند بااعمال یک میدان الکتریکی یکنواخت ، که در آن اتم یک انرژی اضافی $V = -eE \cdot (\mathbf{r}^{(1)} - \mathbf{r}^{(2)})$ با $e = 4.8 \times 10^{-10}$esu کسب می‌کند ، مشاهده شود . هامیلتونی‌اتم پوزیترونیوم دریک‌میدان الکتریکی دیگر نسبت به‌جایگشت متقارن نیست ،بنابراین ذرات تمیزناپذیر نیستندوحالتهای با تقارن معین وجود ندارد .

حل معادله شرودینگر برای یک سیستم از ذرات برهم‌کنش‌کننده خیلی مشکل است.اما برای سیستمهای "ایده‌آل "که در آنها برهم‌کنشهای دوجسمی نادیده گرفته می‌شوند ، همیشه ممکن‌است (۹ــ۱۵)را به N معادله یک ذره‌ای تجزیه‌گرد . بنابراین مسئله چندجسمی‌ایده‌آل ، علی‌الاصول قابل حل است . سیستمهای ایده‌آل بخصوص وقتی‌که تقریب نزدیکی‌از سیستمهای حقیقی باشند مفیدند . معمولا" ، وقتی یک گاز حقیقی به‌حد کافی رقیق باشد ، فاصلهٔ بین ذرات زیاد است . برهم‌کنشها قابل صرفنظرکردن است و گاز می‌تواند به‌عنوان یک گاز ایده‌آل درنظرگرفته شود . لیکن ، اثرات کوانتومی تمیزناپذیری هنوز می‌توانندبرقرارباشند.

۵ ــ سیستمهای ایده‌آل تمیزپذیر

سیستمی از N ذره تمیزپذیر بدون برهم‌کنش را که هرکدام ازآنها دارای جرم متفاوت $m^{(q)}$ بوده و تحت تاثیر پتانسیل خارجی متفاوت $V^{(q)} = V^{(q)}(\mathbf{r}^{(q)})$ قرار دارد درنظربگیریم. معادله شرودینگر برای این سیستم‌عبارت است از

$$\begin{aligned}\mathscr{H}\Psi_\alpha &= \left\{\sum_{q=1}^{N} \frac{-\hbar^2}{2m^{(q)}} \nabla^{(q)2} + V^{(q)}(\mathbf{r}^{(q)})\right\}\Psi_\alpha(\mathbf{r}^{(1)}, \ldots, \mathbf{r}^{(N)}) \\ &= E_\alpha \Psi_\alpha(\mathbf{r}^{(1)}, \ldots, \mathbf{r}^{(N)})\end{aligned} \qquad (۹-۲۱)$$

با در نظر گرفتن جوابی به‌شکل

$$\Psi_\alpha = \psi_l^{(1)}(\mathbf{r}^{(1)}) \cdots \psi_j^{(N)}(\mathbf{r}^{(N)}) \qquad (۹-۲۲)$$

معادله بالا به N معادله یک ذره‌ای به‌شکل

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m^{(q)}}\nabla^{(q)2}+V^{(q)}\right\}\psi_i^{(q)}(\mathbf{r}_i^{(q)})=\varepsilon_i^{(q)}\psi_i^{(q)}(\mathbf{r}_i^{(q)}) \qquad (q=1,\ldots,N) \qquad (۲۳-۹)$$

با

$$E_\alpha=\sum_{q=1}^{N}\varepsilon_i^{(q)}$$

تفکیک می‌شود . به‌بیان دیگر وقتی برهم‌کنشها نادیده گرفته می‌شوند ، معادله شرودینگر (۹–۲۱) تفکیک می‌شود و هر ذره مجموعه حالتهای تک‌ذره‌ای $\psi_i^{(q)}$ و انرژیهای $\varepsilon_i^{(q)}$ خاص خودرا که دریک معادله تک‌ذره‌ای صدق می‌کنند دارد . این حالتهای تک‌ذره‌ای گاهی‌اوقات "مدار" نامیده‌می‌شوند . مدارها دراتمها و مولکولهارا در فصل ۱۰بحث خواهیم‌کرد .چون عموما"به‌هرذره‌معادله‌شرودینگرمتفاوتی‌حکمفرماست(یعنی $m^{(q)}\neq m^{(t)}$ و $V^{(q)}\neq V^{(t)}$) ، طبیعت طیفها و مدارها از ذره‌ای به‌ذره دیگر تغییر می‌کند .شاخصهای فوقانی در $\psi_i^{(q)}$ و $\varepsilon_i^{(q)}$ مبین این نکته‌اند . چون نماد مداری i اشاره به‌سه (وقتی اسپین وجود داشته باشد چهار) عدد کوانتومی دارد نماد حالتی کلی α مخفف $3N$ (یا $4N$) عدد کوانتومی‌است .

حالت‌کل وقتی معلوم‌است که مدارهای اشغال شده به‌وسیله هر ذره داده شده باشند . *تابع حالت کل حاصل‌ضرب ساده‌ای از این توابع مداری است ، در حالی‌که انرژی کل‌درست مجموع انرژیهای مداری متناظر است .*

به‌عنوان یک مثال ، دو ذره بدون اسپین‌تمیزپذیر به‌جرمهای m_1 و m_2 واقع در یک چاه پتانسیل یک بعدی بینهایت به‌عرض a در نظر بگیریم . معادله‌شرودینگرعبارت‌است‌از

$$\left[\left\{-\frac{\hbar^2}{2m_1}\frac{d^2}{dx^{(1)2}}-\frac{\hbar^2}{2m_2}\frac{d^2}{dx^{(2)2}}\right\}+\{V^{(1)}+V^{(2)}\}\right]\Psi_\alpha(x^{(1)},x^{(2)})$$
$$=E_\alpha\Psi_\alpha(x^{(1)},x^{(2)}), \qquad (۲۴-۹)$$

که در آن

$$V^{(1)}=V^{(2)}=0 \qquad , \qquad 0\leqslant x\leqslant a$$
$$V^{(1)}=V^{(2)}=\infty \qquad \text{جاهای دیگر}$$

با استفاده از

$$\Psi_\alpha=\psi_n^{(1)}(x^{(1)})\psi_{n'}^{(2)}(x^{(2)})$$

این معادله به

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m_1}\frac{d^2}{dx^{(1)2}}+V^{(1)}\right\}\psi_n^{(1)}(x^{(1)})=\varepsilon_n^{(1)}\psi_n^{(1)}(x^{(1)})$$

و

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m_2}\frac{d^2}{dx^{(2)2}}+V^{(2)}\right\}\psi_{n'}^{(2)}(x^{(2)})=\varepsilon_{n'}^{(2)}\psi_{n'}^{(2)}(x^{(2)})$$

تفکیک می‌شود . جوابها ، که قبلا" نیز آنها را دیده‌ایم ، عبارتنداز

$$\psi_n(x^{(1)})=\left(\frac{2}{a}\right)^{1/2}\sin\frac{n\pi}{a}x^{(1)},\qquad \varepsilon_n^{(1)}=\frac{\hbar^2}{2m_1}\frac{\pi^2}{a^2}n^2$$

و

$$\psi_{n'}(x^{(2)})=\left(\frac{2}{a}\right)^{1/2}\sin\frac{n'\pi}{a}x^{(2)},\qquad \varepsilon_{n'}^{(2)}=\frac{\hbar^2}{2m_2}\frac{\pi^2}{a^2}n'^2$$

$$(n, n'=1, 2, \ldots)$$

ویژه حالتهای انرژی کل و ویژه مقدارها به‌صورت

$$\Psi_\alpha=\Psi_{n,n'}(x^{(1)}, x^{(2)})=\frac{2}{a}\sin\frac{n\pi}{a}x^{(1)}\sin\frac{n'\pi}{a}x^{(2)} \qquad (۹-۲۵\text{الف})$$

و

$$E_\alpha=E_{n,n'}=\frac{\hbar^2\pi^2}{2a^2}\left(\frac{n^2}{m_1}+\frac{n'^2}{m_2}\right) \qquad (۹-۲۵\text{ب})$$

در می‌آیند .

آنچه که باید مشخص شود اعداد کوانتومی حالتهای n و n' است که به‌وسیله ذرات m_1 و m_2 اشغال شده‌اند . این تجویز یک آرایش نامیده می‌شود . به‌عنوان‌مثال،آرایش حالت پایه عبارت است از $n=1$ ، $n'=1$ به‌طوری که

$$\Psi_\alpha=\Psi_{1,1}=\frac{2}{a}\sin\frac{\pi}{a}x^{(1)}\sin\frac{\pi}{a}x^{(2)}$$

و

$$E_\alpha = E_{1,1} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2a^2}\left(\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2}\right)$$

این مثال می‌تواند به‌راحتی به N ذره بدون برهم‌کنش تعمیم داده شود . در اینجا آرایش به‌وسیله مجموعه‌ای از اعداد کوانتومی n ، n' ، n'' ، . . . ، و غیره ، که حالتهای مداری اشغال شده به‌وسیله هر ذره را نشان می‌دهند مشخص می‌شود . تاکید می‌کنیم‌که یک آرایش تنها وقتی معنی دارد که معادله شرودینگر چند ذره‌ای اصلی تفکیک‌پذیر باشد . این وقتی رخ می‌دهد که سیستم ایده‌آل باشد . برای سیستمهای حقیقی ، آرایشهای مدارهای مستقل کاملا" تعریف شده نیستند ، اما در روشهای وردشی و سایر روشهای تقریبی به‌صورت مفیدی به‌کار می‌آیند .

۶ـ سیستمهای ایده‌آل تمیزناپذیر

وقتی سیستمی از ذرات بدون برهم‌کنش تمیزناپذیر تشکیل شده‌است (یعنی $m_q = m$ و $V^{(q)} = V$) تمام معادلات شرودینگر تک ذره‌ای یکسان‌اند و به‌شکل

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^{(q)2} + V(\mathbf{r}^{(q)})\right\}\psi_i(\mathbf{r}^{(q)}) = \varepsilon_i\psi_i(\mathbf{r}^{(q)}) \qquad (۹-۲۶)$$

می‌باشند . چون مدارها و ویژه مقدارهای آنها برای تمام ذرات یکسانند ، شاخص فوقانی‌در ψ_i و ε_i حذف شده است . تابع حالتهای کل مشابه با (۹ـ۲۲) خواهند شد

$$\Psi_\alpha = \psi_i(\mathbf{r}^{(1)})\cdots\psi_j(\mathbf{r}^{(N)}) \qquad (۹-۲۷ \text{ الف})$$

با

$$E_\alpha = \sum_i \varepsilon_i \qquad (۹-۲۷ \text{ ب})$$

ضرب وجمع روی تمام مدارهای اشغال‌شده منظور شده‌است . متاسفانهٔ ضرب ساده‌در (۹ـ۲۷) شرط تمیزناپذیری را نقض می‌کند زیرا Ψ_α نسبت به‌جایگشت دارای تقارن معینی نیست . اما، می‌توان همیشه یک تابع که به‌طور مناسب متقارن شده باشد از (۹ـ۲۷) ساخت . توجه کنیم‌که نمادهای مختصه‌ای در (۹ـ۲۷) می‌توانند به‌تعداد $N!$ جابه‌جا شوند . با جمع این‌حاصلضربهای جابه‌جاشده و تقسیم بر $(N!)^{1/2}$ برای بهنجارش ، یک Ψ_α^s با همان انرژی به‌دست می‌آوریم‌که

نسبت به‌جایگشتها متقارن است .

این عمل را با عملگر متقارن‌ساز $\mathscr{P}$ که دقیقاً" همان اثر مذکور در بالا را دارد نمایش می‌دهیم ، یعنی ،

$$\Psi_\alpha{}^s = \frac{1}{(N!)^{1/2}} \mathscr{P}\psi_i(\mathbf{r}^{(1)}) \cdots \psi_j(\mathbf{r}^{(N)}) \qquad (۲۸-۹)$$

وقتی $\mathscr{P}$ روی یک حاصل‌ضرب ساده ، مثل (۷ـ۲۹الف) عمل می‌کند ، حاصل جمعی از $N!$ حاصلضرب جابه‌جاشده ایجاد می‌کند که خود به‌خود یک تابع حالت متقارن است .

به‌همین‌طریق ، می‌توان یک تابع پاد متقارن با استفاده از عملگر پاد متقارن‌ساز $\mathscr{A}$ ساخت که دارای خاصیت زیر باشد

$$\Psi_\alpha{}^A = \frac{1}{(N!)^{1/2}} \mathscr{A}\psi_i(\mathbf{r}^{(1)}) \cdots \psi_j(\mathbf{r}^{(N)}) \qquad (۲۹-۹)$$

این عمل تقریباً" شبیه به‌عملی است که در (۹ـ۲۸) انجام شد با این تفاوت که جمله‌هائی‌که با تعداد فردی جایگشت از حاصلضرب اولیه حاصل شده‌اند ، به‌جای اضافه‌شدن ،تفریق می‌شوند .اثر خالص‌عبارت است از ایجاد ویژه تابعی که نسبت به‌جایگشتها پاد متقارن‌است.

روش متقارن‌سازی را با استفاده از دو ذره واقع در چاه بینهایت بحث شده در بخش ۵ نشان خواهیم داد . اما ، این بار فرض خواهیم کرد که ذرات تمیزناپذیرانند (یعنی ، $m_1 = m_2$) و از اسپین نیز صرفنظر خواهیم کرد .

تابع حالت کل دیگر حاصل ضرب ساده‌ای مثل (۹ـ۲۵) نیست . متقارن‌سازی مناسبی نتیجه می‌دهد*

$$\Psi_\alpha = \Psi_{nn'} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \frac{2}{a} \sin\frac{n\pi}{a} x^{(1)} \sin\frac{n'\pi}{a} x^{(2)} \pm \frac{2}{a} \sin\frac{n\pi}{a} x^{(2)} \sin\frac{n'\pi}{a} x^{(1)} \right\}$$
(۹ـ۳۰ الف)

با

$$E_{nn'} = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{a^2}(n^2 + n'^2) \qquad (۹-۳۰ \text{ ب})$$

---

* برای اختصار نمادهای اسپینی را حذف می‌کنیم و فرض می‌کنیم هردو ذره در یک حالت اسپینی باشند .

علامت بالائی برای بوزونهااست در حالی که علامت پائینی برای فرمیونهاست .توجه‌کنیم که در حالی که آرایش به‌وسیله دوعدد کوانتومی n و n' داده می‌شود ، هیچکدام از آنها وابسته به‌یکی‌از ذرات نیست . چون این ذرات تمیزناپذیراند ، فقط می‌گوئیم که حالتهای مداری n و n' را اشغال می‌کنند .دیگر نمی‌توان گفت که کدام یک در کدام حالت است .

نمایش دیگری برای یک حالت پاد متقارن با ساختن *دترمینان اسلاتر* از مدارهای‌اشغال شده به‌دست می‌آید ، یعنی ،

$$\Psi_\alpha{}^{A} = \frac{1}{(N!)^{1/2}} \begin{vmatrix} \psi_i(\mathbf{r}^{(1)}) & \cdots & \psi_j(\mathbf{r}^{(1)}) \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \psi_i(\mathbf{r}^{(N)}) & \cdots & \psi_j(\mathbf{r}^{(N)}) \end{vmatrix} \qquad (۹-۳۱)$$

همان‌طور که با بسط دترمینان می‌توان تحقیق کرد ، معادله (۹-۳۱)با (۹-۲۹)یکسان‌است . دترمینان اسلاتر روش مناسبی برای نمایش حالت فرمیونهای تمیزناپذیر ایده‌آل (به‌عنوان مثال ، الکترونهای رسانشی در یک فلز) است .

اگر دو ذره در یک نقطه از فضا باشند ، در این صورت دو سطر از (۹-۳۱)یکسان‌اند و تابع حالت کل صفر خواهد شد . این نکته شکل عمومی اصل پاولی را ثابت می‌کند . اما ، هم‌چنین توجه کنیم که اگر دو فرمیون یک مدار را اشغال‌کنند ، دوستون برابر می‌شوند و دترمینان بازهم صفر می‌شود . این مطلب ما را به‌شکل خاص اصل پاولی هدایت می‌کند .

اصل طرد پاولی (برای فرمیونها) : در هر آرایشی ، هیچ دو فرمیون تمیزناپذیری نمی‌توانند هردو دریک حالت تک‌ذره‌ای باشند . به‌طورمعادل ،به‌هیچ دو فرمیونی نمی‌توان یک‌مجموعه اعداد کوانتومی یکسان نسبت داد .

۷ـ همبستگیهای آماری در سیستمهای ایده‌آل بوزوفرمی

خاطرنشان شد که حتی در سیستمهای کوانتومی ایده‌آل ، بوزونها و فرمیونهای تمیز ناپذیر می‌توانند ، به‌ترتیب ، یکدیگر را جذب و دفع کنند . ما این مطلب را برای دوذره آزاد ، بدون برهم‌کنش، تمیزناپذیر ، در یک بعد ، نشان خواهیم داد . چون حالتهای تک ذره‌ای ، بدون درنظرگرفتن اسپین ، به‌شکل e^{ikx} هستند ، حالت کل سیستم که به‌طورمناسب متقارن شده است* (به‌جز ضریب بهنجارش) عبارت است از

---

* بازهم فرض می‌کنیم دوذره دریک‌حالت اسپینی قرار دارند و از نمادهای اسپینی‌صرفنظر کرده‌ایم .

$$\Psi_\alpha = \Psi_{kk'}(x_1, x_2) = e^{ikx_1}e^{ik'x_2} \pm e^{ikx_2}e^{ik'x_1} \qquad (۹-۳۲)$$

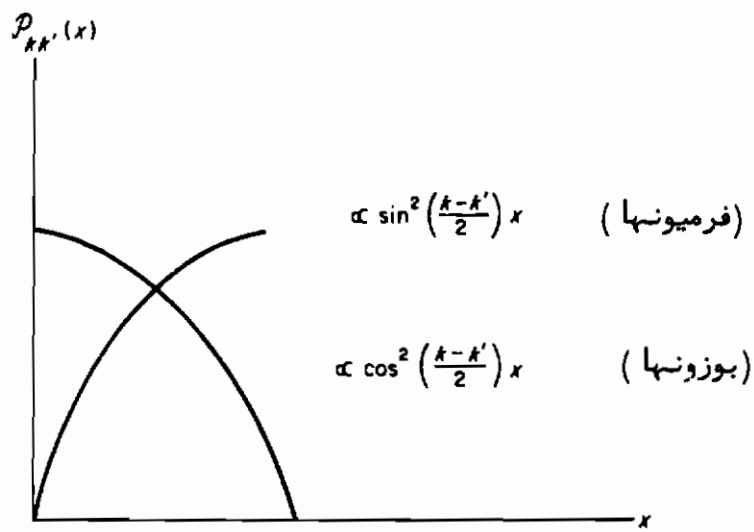
با واردکردن متغیرهای $x = x_2 - x_1$ و $X = \frac{1}{2}(x_2 + x_1)$ ، تابع حالت (۹–۳۲) می‌شود

$$\Psi_{kk'}(x, X) = e^{i(k+k')X}[e^{i(k-k')x/2} \pm e^{-i(k-k')x/2}] \qquad (۹-۳۳)$$

متغیرهای x و X به‌ترتیب معرف فاصله نسبی و مرکز جرم دو ذره می‌باشند . با مربع‌کردن (۹–۳۳) (ضرب آن در مزدوج مختلط خود) ، نتیجه می‌شودکه چگالی احتمال یافتن‌سیستم با فاصله بین ذره‌ای x عبارت است از (شکل ۹–۲)

$$\mathscr{P}_{kk'}(x) \propto \cos^2\left(\frac{k-k'}{2}\right)x \qquad \text{(بوزونها)}$$

$$\propto \sin^2\left(\frac{k-k'}{2}\right)x \qquad \text{(فرمیونها)} \qquad (۹-۳۴)$$



شکل (۹–۲) نمودار توابعی که‌نشان‌دهندهٔ احتمال یافتن دو ذره آزادتمیز–ناپذیر با جدائی x در یک بعد ، می‌باشند .

چگالی احتمال در جدائی صفر برای بوزونها بیشینه و برای فرمیونها صفر است (اصل پاولی) . به‌معنی آماری ، بوزونها تمایل دارند که در نزدیکی یکدیگر قرار بگیرند در حالی که

فرمیونها طوری حرکت می‌کنند که گوئی فرمیونهای دیگر را طرد می‌کنند*.

در عمل، هیچ سیستم ذراتی در حقیقت ایده‌آل نیست. یک سئوال مهم که باید پاسخ داده شود این است که آیا برهم‌کنشها در یک سیستم حقیقی آنقدر کوچک هستند که اجازه دهند یک سیستم ایده‌آل به‌عنوان یک تقریب مرتبه صفر به‌کار رود یا خیر. ما یک مسئله نمونه‌ای دو الکترونی را در حد ایده‌آل با فرض اینکه برهم‌کنش کولنی قابل صرفنظرکردن باشد بررسی خواهیم کرد.

۸ ــ اتم هلیوم "ایده‌آل"

اتم هلیوم تشکیل شده است از دو الکترون که به‌وسیله یک نیروی کولنی به‌یک هسته با بار Ze ($Z=۲$) مقید شده‌اند. هامیلتونی الکتروستاتیکی عبارت است از

$$\mathscr{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^{(1)2} - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^{(2)2} - \frac{Ze^2}{r^{(1)}} - \frac{Ze^2}{r^{(2)}} + \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(2)} - \mathbf{r}^{(1)}|} \qquad (۳۵-۹)$$

اگر از جمله برهم‌کنش صرفنظر کنیم، معادله شرودینگر به‌دومعادله هیدرژن مانند تفکیک می‌شود که هرکدام از آنها به‌شکل

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{Ze^2}{r}\right\}\psi_{nlm_lm_s} = \varepsilon_{nl}\psi_{nlm_lm_s} \qquad (۳۶-۹)$$

است که در آن

$$\psi_{nlm_lm_s} = R_{nl}(r)Y_{lm_l}(\theta,\phi)|m_s\rangle \qquad (۳۷-۹)$$

و**

---

* همبستگیهای آماری مخصوصا" در $(k-k')x \ll 1$ یا $x \ll 1/(k-k')$ اهمیت پیدا می‌کنند. با توجه به‌اینکه طول موج دوبروی وابسته به‌تکانه نسبی ذرات برابر $\lambda = 2\pi/(k-k')$ است مشاهده می‌کنیم که شرط فوق می‌تواند به‌صورت $x \ll \lambda$ نوشته شود. هم‌چنین توجه کنیم که برای فرمیونها، تابع احتمال، وقتی دو ذره در یک حالت تکانه قرار دارند (یعنی $k=k'$) متحد با صفر می‌شود.

** چون ویژه‌تابعهای کولنی یک‌تبهگنی تصادفی ایجاد می‌کنند، انرژیها مستقل از l می‌باشند. اما، برای عمومیت بیشتر، انرژی را چنان در نظر خواهیم گرفت که گوئی وابستگی به l وجود داشته است. در واقع برای اتمهای حقیقی، همانطوری که در فصل ۱۰ خواهیم دید، وضعیت این چنین است.

$$\varepsilon_{nl} = -\frac{Z^2(13.6)}{n^2} = -\frac{54}{n^2} \quad \text{eV}$$

توابع موج هیدرژن مانند با جایگذاری $a \to a/Z$ در (۵ـ۷۴) به‌دست می‌آیند . چون الکترونها فرمیون هستند ، حالت کل اتم هلیوم ایده‌ال می‌تواند به‌وسیله دترمینان اسلاتر

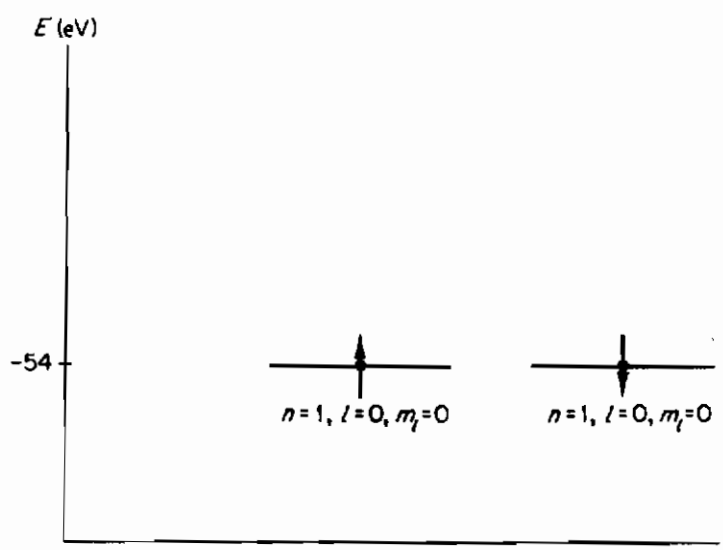
$$\Psi_\alpha = \Psi_{\substack{nlm_lm_s \\ n'l'm_l'm_s'}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix} \psi_{nlm_lm_s}(1) & \psi_{n'l'm_l'm_s'}(1) \\ \psi_{nlm_lm_s}(2) & \psi_{n'l'm_l'm_s'}(2) \end{vmatrix} \qquad (\text{۹ـ۳۸ الف})$$

نمایش داده شود . انرژی متناظر عبارت است از

$$E_\alpha = E_{nln'l'} = \varepsilon_{nl} + \varepsilon_{n'l'} = -54\left(\frac{1}{n^2} + \frac{1}{n'^2}\right) \qquad (\text{۹ـ۳۸ ب})$$

توجه کنیم که در حالی که برای حالت آرایشی هلیوم ایده‌آل هشت عدد کوانتومی مورد نیاز است ، انرژی متناظر تنها بستگی به‌دوتا از این اعداد دارد . بنابراین آرایشها می‌توانند بسیار تبهگن باشند .

برای انرژی حالت پایه داریم $n = n' = 1$. چون در این مورد اعداد کوانتومی l ، l' ، m_l و m_l' باید همه صفر باشند ، از اصل پاولی نتیجه می‌شود که اعداد کوانتومی اسپینی باید متفاوت باشند ، یعنی $m_s = \frac{1}{2}$ ، $m_s' = -\frac{1}{2}$ (شکل ۹ـ۳) . حالت پایه هلیوم ایده‌آل ناتبهگن و یکتاست و می‌تواند به‌صورت زیر نوشته شود



شکل (۹ـ۳) آرایش الکترونهای هلیوم در حالت پایه . انرژی حالت پایه ، با صرفنظر کردن از برهم‌کنش بین الکترونها ، عبارت است از $E = -54 + (-54) = -108$ eV

$$\Psi_{\substack{100\ \frac{1}{2}\\ 100-\frac{1}{2}}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_{100}(1)\psi_{100}(2)\begin{vmatrix} |\tfrac{1}{2}\rangle^{(1)} & |-\tfrac{1}{2}\rangle^{(1)} \\ |\tfrac{1}{2}\rangle^{(2)} & |-\tfrac{1}{2}\rangle^{(2)} \end{vmatrix}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_{100}(1)\psi_{100}(2)[|\tfrac{1}{2}\rangle^{(1)}|-\tfrac{1}{2}\rangle^{(2)} - |\tfrac{1}{2}\rangle^{(2)}|-\tfrac{1}{2}\rangle^{(1)}]$$

(۹ـ۳۹ الف)

با

$$E_{nn'} = E_{11} = -54\left[\frac{1}{1^2}+\frac{1}{1^2}\right] = -108 \quad \text{eV} \qquad \text{(حالت پایه)}$$

(۹ـ۳۹ ب)

حالت *یکبار یونیزه هلیوم* متناظر است با اینکه یک الکترون در حالت $n = 1$ و الکترون دیگر در حالت آزاد $n' = \infty$ قرار داشته باشد . انرژی این حالت عبارت است از

$$E_{mm'} = E_{1\infty} = -54\left[\frac{1}{1^2}+\frac{1}{\infty^2}\right] = -54 \quad \text{eV}$$

بنابراین اولین انرژی یونش (یعنی ، انرژی لازم برای اینکه اتم را یکبار یونیزه کند) هلیوم ایده‌آل عبارت است از

$$(E_{1\infty} - E_{11}) = -54 - (-108) = 54 \quad \text{eV}$$

به‌طور تجربی معلوم شده است که تنها ۲۴ eV ~ لازم است تا هلیوم را یکبار یونیزه کند . این اختلاف به‌این حقیقت مربوط می‌شود که دافعه الکترون ـ الکترون ، که به‌فرایند یونش کمک می‌کند ، نادیده گرفته شده است . به‌طور وضوح مرتبه بزرگی این اختلاف این راکه ویژه حالتهای اتم‌هلیوم ایده‌آل بتوانند شباهتی باویژه حالتهای اتم هلیوم‌حقیقی داشته‌باشند مشکوک می‌سازد . با این همه ، همان‌طور که در فصل ۱۰ نشان خواهیم داد ، این حالتهای ایده‌آل می‌توانند با اعمال روش و ردشی و دیگر روشهای تقریبی اصلاح شوند .

۹ـ حالتهای برانگیخته در هلیوم

دترمینان اسلاتر در (۹ـ۳۹) معرف حالتی است که در آن الکترونها مدارهای nlm_lm_s و $n'l'm_l'm_s'$ را اشغال می‌کنند . برای نمایش این دترمینان از کت

$$|nn'll'm_l m_l' m_s m_s'\rangle$$

استفاده می‌کنیم . چون اعداد کوانتومی مغناطیسی m_l ، m_l' ، m_s و m_s' در عبارت انرژی ظاهرنمی‌شوند ، انرژی آرایش حداکثر به‌وسیله مقادیر $n-l$ تعیین می‌شود . یک آرایش $n-l$ را با طرحوارهٔ زیر نشان می‌دهیم .

هردو الکترون در تراز	$n = 1$ ، $l = 0$	$(1s^2)$
یک الکترون در تراز	$n = 1$ ، $l = 0$	$(1s^1, 2s^1)$
و دیگری در تراز	$n' = 2$ ، $l' = 0$	
یک الکترون در تراز	$n = 1$ ، $l = 0$	$(1s^1, 2p^1)$
و دیگری در تراز	$n' = 2$ ، $l' = 1$	

آرایش حالت پایه هلیوم یک آرایش $(1s^2)$ است و ، همان‌طورکه دیدیم ، ناتبهگن است و برای آن $E_{11} = -108$ eV . آرایش اولین حالت برانگیخته $(1s^1, 2s^1)$ دارای انرژی

$$E_{12} = -54\left(\frac{1}{1^2} + \frac{1}{2^2}\right) = -68 \quad \text{eV}$$

است و دومرتبه تبهگن است . زیر آرایشهای مغناطیسی

$$|1,2,0,0,m_l m_l' m_s m_s'\rangle$$

عبارتند از (شکل ۹ــ۴)

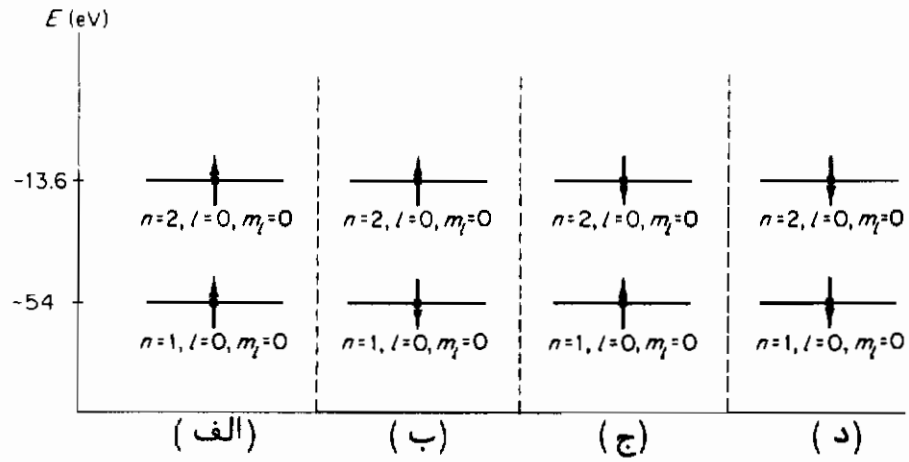
$$\Psi_a = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix} \psi_{100\frac{1}{2}}(1) & \psi_{200\frac{1}{2}}(1) \\ \psi_{100\frac{1}{2}}(2) & \psi_{200\frac{1}{2}}(2) \end{vmatrix}$$

$$\Psi_b = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix} \psi_{100-\frac{1}{2}}(1) & \psi_{200\frac{1}{2}}(1) \\ \psi_{100-\frac{1}{2}}(2) & \psi_{200\frac{1}{2}}(2) \end{vmatrix}$$

$$\Psi_c = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix} \psi_{100\frac{1}{2}}(1) & \psi_{200-\frac{1}{2}}(1) \\ \psi_{100\frac{1}{2}}(2) & \psi_{200-\frac{1}{2}}(2) \end{vmatrix} \qquad (۴۰ - ۹)$$

$$\Psi_d = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix} \psi_{100-\frac{1}{2}}(1) & \psi_{200-\frac{1}{2}}(1) \\ \psi_{100-\frac{1}{2}}(2) & \psi_{200-\frac{1}{2}}(2) \end{vmatrix}$$

در واقع ، تبهگنی یک‌تراز برابر است با تعداد راههائی‌که اعداد مغناطیسی می‌توانند ، با توجه به‌محدودیتهای ناشی‌از اصل طرد ، برای یک آرایش ثابت $n-l$ مرتب شوند . خواننده باید خود را متقاعد کند که آرایش $(1s^1, 2p^1)$ در هلیوم دوازده بار تبهگن است .



شکل (۹ــ۴) چهار آرایش حالت برانگیخته تبهگن اول الکترونهای هلیوم. هرکدام از این حالتها دارای انرژی $E = \simeq -68\ \text{eV}$ است.

یک نتیجه تبهگنی وابسته به‌آرایش n-l عدم یکتایی ویژه حالتهای انرژی است. انتظار داریم که هر ترکیب خطی به‌شکل

$$|nn'll'\rangle = \sum_{\substack{m_l \\ m_l'}} \sum_{\substack{m_s \\ m_s'}} C_{nlm_lm_s}{}_{n'l'm_l'm_s'} \, |nn'll'm_lm_l'm_sm_s'\rangle \qquad (۹-۴۱)$$

معرف یک ویژه حالت جدید انرژی اتم هلیوم ایده‌آل با

$$E_\alpha = E_{\substack{nl \\ n'l'}} = \varepsilon_{nl} + \varepsilon_{n'l'} \qquad (۹-۴۲)$$

باشد. چون علاقه‌مندیم آن حالتهای اتمی ایده‌آل را ایجاد کنیم که به‌بهترین وجهی به‌حالتهای اتم هلیوم حقیقی نزدیک باشند، باید حالتهائی در (۹ــ۴۱) بسازیم که ماتریس پریشیدگی را، که‌در این مورد برهم‌کنش الکتروستاتیکی الکترون، یعنی

$$\lambda \hat{V} = \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(2)} - \mathbf{r}^{(1)}|} \qquad (۹-۴۳)$$

است، قطری کند. دترمینانهای اسلاتر در (۹ــ۴۰) خودشان در این شرط صدق نمی‌کنند. چون یک روش سرراست قطری‌کردن بسیار پیچیده است، مسئله را با استفاده از استدلالهای فیزیکی ساده می‌کنیم.

بهتر است که نخست عملگرهای چند جسمی زیر را وارد کنیم

$$\hat{\mathbf{L}}^{(T)} = \hat{\mathbf{L}}^{(1)} + \hat{\mathbf{L}}^{(2)} \qquad \text{(عملگر تکانه زاویه‌ای کل)}$$
$$\hat{\mathbf{S}}^{(T)} = \hat{\mathbf{S}}^{(1)} + \hat{\mathbf{S}}^{(2)} \qquad \text{(عملگر اسپین کل)}$$

مولفه‌های این عملگرها طبیعتا" در روابط

$$[\hat{L}_i^{(T)}, \hat{L}_j^{(T)}] = i\hbar\hat{L}_k^{(T)}$$

$$(ijk = xyz \text{ در ترتیب دوره‌ای}) \qquad (۴۴-۹)$$

$$[\hat{S}_i^{(T)}, \hat{S}_j^{(T)}] = i\hbar\hat{S}_k^{(T)}$$

صدق می‌کنند .این عملگرها ،همان‌طورکه به‌راحتی می‌توان تحقیق کرد ، با هامیلتونی‌هلیوم ایـده‌آل ، یعنی ، با هامیلتونی‌ای که در آن جمله برهم‌کنش مساوی صفر فرض می‌شود ،جابه جاپذیراند . در نتیجه ، می‌توان فرض کرد که مجموعه‌ای از ویژه‌حالتها با خواص زیر وجـود دارد

$$\begin{aligned}
\mathscr{H}_0|E_\alpha LSM_L M_S\rangle &= E_\alpha|E_\alpha LSM_L M_S\rangle \qquad (E_\alpha = \varepsilon_{nl} + \varepsilon_{n'l'})\\
\hat{L}^{(T)2}|E_\alpha LSM_L M_S\rangle &= L(L+1)\hbar^2|E_\alpha LSM_L M_S\rangle\\
\hat{S}^{(T)2}|E_\alpha LSM_L M_S\rangle &= S(S+1)\hbar^2|E_\alpha LSM_L M_S\rangle\\
\hat{L}_Z^{(T)}|E_\alpha LSM_L M_S\rangle &= M_L\hbar|E_\alpha LSM_L M_S\rangle \qquad (|M_L| \leqslant L)\\
\hat{S}_Z^{(T)}|E_\alpha LSM_L M_S\rangle &= M_S\hbar|E_\alpha LSM_L M_S\rangle \qquad (|M_S| \leqslant S)
\end{aligned} \qquad (۴۵-۹)$$

که مقادیر L و S باید تعیین شوند . آنچه که می‌توانیم بگوئیم ، براساس (۹-۴۴) ،این است که این مقادیر یا صحیح‌اند یا نیمه‌صحیح .

آنچه که در باره عملگرهای $\hat{\mathbf{L}}^{(T)}$ و $\hat{\mathbf{S}}^{(T)}$ غیرعادی است این است که با هامیلتونی کل (۹-۳۵) نیز جابه‌جاپذیراند . به‌طور معادل ، این مشاهده‌پذیرها ، حتی در حضـور دافعـه الکتروستاتیکی بین الکترونها ، پایسته‌اند . بنابراین حالتهای اتمی اتم هلیوم حقیقی ویژه حالتهای همزمان $\hat{\mathbf{L}}^{(T)}$ و $\hat{\mathbf{S}}^{(T)}$ هستند و به‌نظر موجه می‌آیدکه حالتهای مذکور درفوق،(۹-۴۵)، تقریبهای مرتبه صفرمناسبی باشند .یک محاسبه مستقیم ، ولی نه آنقدر ساده ، نشان‌می‌دهد که حالتهای (۹-۴۵) حقیقتا" جمله پریشیدگی الکتروستاتیکی را قطری می‌کنند . آنچـه کـه می‌ماند پیداکردن ضرایبی‌است‌که دترمینانهای اسلاتر را به‌حالتهای اتمی مربوط کنند ،یعنی،

$$|E_\alpha LSM_L M_S\rangle = \sum_{m_l}\sum_{m_l'}\sum_{m_s}\sum_{m_s'} C_{nlm_lm_s}{}_{n'l'm_l'm_s'}\,|nn'll'm_l m_l' m_s m_s'\rangle \qquad (۴۶-۹)$$

این ضرایب کلبش ـ گوردان خیلی پیچیده‌تر از آن هستند که بتوان آنها را در اینجا محاسبه کرد ، اما محاسبات مزبور می‌توانند با استفاده از روشهای نظریه گروه تا حدی ساده شوند . ما صرفا" به‌ذکر این نکته قناعت می‌کنیم که این ضرایب در جدولها وجود دارند*.

ساختن ویژه حالتهای اتمی $\hat{L}^{(T)}$ و $\hat{S}^{(T)}$ به‌طریق (۶ـ۴۹) به‌نام ترکیب L–S یا ترکیب راسل[1] ـ ساوندرز[2] موسوم است . می‌توان مقادیر مجاز L و S برای آرایش داده شده n–l را با استفاده از مدل برداری که در فصل ۶ آمد نتیجه‌گیری کرد . این مدل پیشگوئی می‌کند که مقادیر مجاز L و S با فواصل عدد صحیح تغییر می‌کنند و محدود به‌روابط

$$|l-l'| \leqslant L \leqslant l+l' \qquad \text{و} \qquad |s-s'| \leqslant S \leqslant s+s' \qquad (۴۷-۹)$$

هستند . چون برای الکترونها داریم $s=s'=\frac{1}{2}$ ، عدد کوانتومی اسپین کل برای حالتهای اتمی هلیوم یا $S=0$ است یا $S=1$. در یک آرایش $(1s^1, 2p^1)$ ، یعنی ، $l=0$ و $l'=1$ ، مقادیر مجاز L عبارتند از $L=0$ یا $L=1$. یک هشدار در اینجا لازم است . یادآوری کنیم که جمع (۹ـ۴۶) تنها روی آن آرایشهایی انجام می‌شود که با اصل طرد پاولی سازگارانـد . اما ، مدل برداری حالتهائی ایجاد می‌کند که بعضی از آنها تنها می‌توانند از آرایشهایی که این اصل را نقض می‌کنند ساخته شوند . در نتیجه مدل مزبور در واقع یک حد بالایی بـرای مقادیر مجاز L و S به‌دست می‌دهد . بعضی از این مقادیر باید به‌وسیله اصل طرد پاولـی رد شوند .اصل طرد بخصوص وقتی‌که آرایشهایی را که در آنها الکترونها دارای اعداد کوانتومی اصلی (n) و مداری (l) یکسان باشند ترکیب می‌کنیم ، موثر است . در این‌مورد ، گفتـه می‌شود کـه الکترونها هم‌ارزند . بنابراین باید دقت شود که در پیونـد الکترونهای هـم‌ارز بعضی از حالتها که توسط مدل برداری پیش‌بینی می‌شوند ، حذف شوند .

آرایش حالت پایه هلیوم عبارت است از $(1s^2)$. در این حالت ، با الکترونهای هم‌ارز سروکار داریم زیرا $n=n'=1$ و $l=l'=0$. چون اصل طرد پاولی تنها یک زیر آرایش مغناطیسی (یعنی ، $m_l=0$ ، $m_l'=0$ ، $m_s=\frac{1}{2}$ ، $m_s'=-\frac{1}{2}$) را مجاز می‌دا ند ، ایـن تراز ناتبهگن و یکتا است . بر طبـق مـدل برداری (۹ ـ ۴۷) ، حالتهای اتمی با $L=0$ ، $S=0$ و $L=0$ ، $S=1$ امکان‌پذیر هستند .اما حالت اخیر دارای سه زیر حالت مغناطیسی

1- Russel 2- Saunders

* به‌عنوان مثال به‌کتاب زیر رجوع کنید

A. Messiah, "Quantum Mechanics," Volume II, P. 1054.Wiley, New York, 1962,.

$(M_s = \pm 1 \text{ ، } M_s = 0)$است که تبهگن‌اند و بنابراین نمی‌توانند معرف حالت پایه باشند. لذا می‌توانیم حالت پایه هلیوم را به‌صورت زیر مشخص کنیم (رک ۹ــ۳۹)

$$
\begin{aligned}
|(1s^2)\rangle = |ELSM_L M_S\rangle &= |-108,0,0,0,0\rangle \\
&= [1/\sqrt{2}]\psi_{100}(1)\psi_{100}(2) \\
&\quad \times\{|\tfrac{1}{2}\rangle^{(1)}|-\tfrac{1}{2}\rangle^{(2)} - |\tfrac{1}{2}\rangle^{(2)}|-\tfrac{1}{2}\rangle^{(1)}\} \qquad (۴۸-۹)
\end{aligned}
$$

به‌بیان دیگر، چون حالت پایه هلیوم ناتبهگن است، دترمینان اسلاتر درطرف‌راست(۹ــ۴۸) نیز یک ویژه حالت $\hat{L}^{(T)2}$، $\hat{L}_Z^{(T)}$ ، $\hat{S}_Z^{(T)2}$ و $\hat{S}^{(T)}$ با ویژه‌مقدارهای $L = S = M_L = M_S = 0$است.

چهار دترمینان برانگیخته اسلاتر در (۹ــ۴۰) که متناظر با آرایش $(1s^1, 2s^1)$ هستند، می‌توانند طبق مدل برداری، به‌صورت $L = 0$ ، $S = 0$ یا $L = 0$ ، $S = 1$ ترکیب شوند. چون اولی ناتبهگن و دومی سه‌بار تبهگن است، تبهگنی کل تراز، همان‌طور که انتظار می‌رفت، چهارگانه است. در این مورد هردو حالت ایجاد شده به‌وسیله مدل برداری با اصل پاولی سازگاراند. این نتیجه قابل انتظار بود زیرا الکترونها در آرایش $(1s^1, 2p^1)$ غیر هم‌ارزاند (یعنی $m \neq m'$).

بدون اثبات بیان می‌کنیم که ضرایب کلبش ــ گوردان در (۹ــ۴۱) برای آرایش $(1s^1, 2s^1)$ حالتهای اتمی زیر را می‌دهند،

$$
|E, L, S, M_L, M_S\rangle
$$

$$
S=0 \begin{cases} |-68,0,0,0,0\rangle \rightarrow \dfrac{\{\psi_{100}(1)\psi_{200}(2) + \psi_{100}(2)\psi_{200}(1)\}}{\sqrt{2}} \\ \qquad \times \dfrac{\{|\tfrac{1}{2}\rangle^{(1)}|-\tfrac{1}{2}\rangle^{(2)} - |\tfrac{1}{2}\rangle^{(2)}|-\tfrac{1}{2}\rangle^{(1)}\}}{\sqrt{2}} \end{cases}
$$

$$
S=1 \begin{cases} |-68,0,1,0,1\rangle \rightarrow \dfrac{\{\psi_{100}(1)\psi_{200}(2) - \psi_{100}(2)\psi_{200}(1)\}}{\sqrt{2}}|\tfrac{1}{2}\rangle^{(1)}|\tfrac{1}{2}\rangle^{(2)} \\ |-68,0,1,0,0\rangle \rightarrow \dfrac{\{\psi_{100}(1)\psi_{200}(2) - \psi_{100}(2)\psi_{200}(1)\}}{\sqrt{2}} \\ \qquad \times \dfrac{\{|\tfrac{1}{2}\rangle^{(1)}|-\tfrac{1}{2}\rangle^{(2)} + |\tfrac{1}{2}\rangle^{(2)}|-\tfrac{1}{2}\rangle^{(1)}\}}{\sqrt{2}} \\ |-68,0,1,0,-1\rangle \rightarrow \dfrac{\{\psi_{100}(1)\psi_{200}(2) - \psi_{100}(2)\psi_{200}(1)\}}{\sqrt{2}}|-\tfrac{1}{2}\rangle^{(1)}|-\tfrac{1}{2}\rangle^{(2)} \end{cases} \qquad (۴۹-۹)
$$

این چهار حالت برانگیخته دارای خواص زیراند .

(الف) با وجودی که خودشان دترمینان اسلاتر نیستند ، اما ترکیباتی خطی از چهار دترمینان داده شده در (۹ــ۴۰) می‌باشند .

(ب) ویژه تابعهای $\hat{L}^{(T)2}$ ، $\hat{S}^{(T)2}$ ، $\hat{L}_Z^{(T)}$ و $\hat{S}_Z^{(T)}$ هستند . در اولین حالت داریم $L = S = M_L = M_S = 0$ ؛ چون تبهگنی مغناطیسی $(2S+1)$ برابر یک است ، این حالت یک حالت یگانه است . سه‌حالت آخر متعلق به‌مقدار $S = 1$ است و M_S آنها به‌ترتیب برابرند با ۱+ ، 0 و ۱ــ . بنابراین حالت $S = 1$ یک حالت سه‌گانه را بیان می‌کند . تبهگنی اسپینی ، $2S+1$ ، چندگانگی حالت نامیده می‌شود .

(ج) همهٔ آنها دارای انرژی

$$E_{12} = -54\left(\frac{1}{1^2} + \frac{1}{2^2}\right) = -68 \quad \text{eV}$$

هستند .

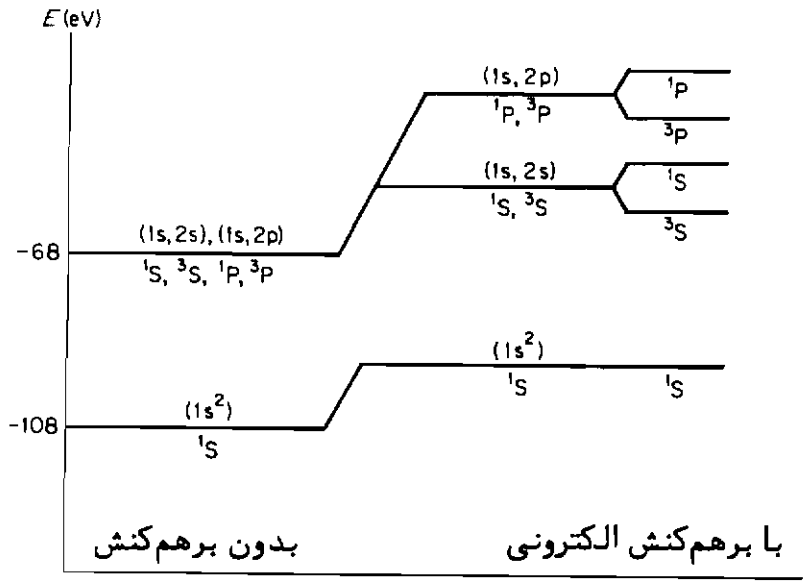
(د) همه آنها از یک قسمت فضائی متقارن و یک قسمت اسپینی پاد متقارن یا برعکس تشکیل شده‌اند ، در نتیجه ، هرکدام از آنها کلاً" پاد متقارن است ، همان‌طور که برای فرمیونها لازم است .

(هـ) مهمتر از همه ، جمله برهم‌کنش الکتروستاتیکی در (۹ــ۳۵) را قطری می‌کنند و بنابراین یک تقریب مرتبه صفر مناسبی برای ویژه حالتهای انرژی اتم هلیوم حقیقی تشکیل می‌دهند .

مقادیر L و S یک حالت اتمی از نظر طیف نمائی با به‌کاربردن یک حرف بزرگ برای نمایش مقدار L و یک شاخص بالا برای نمایش چندگانگی $2S+1$ نشان داده می‌شوند . به‌عنوان مثال ، حالت ^1S دارای $L = S = 0$ است ، در حالی که ^3P دارای $L = 1$ و $S = 1$ می‌باشد .

آرایش $(1s^1, 2p^1)$ در هلیوم دوازده‌بار تبهگن است . طبق مدل برداری ، می‌توانیم آرایش مغناطیسی را با حالتهای اتمی با $L = 1$ ، $(^1P)\ S = 0$ و $L = 1$ ، $S = 1$ (^3P) ترکیب کنیم . چون حالت اخیر نه‌بار و حالت قبلی سه‌بار تبهگن است تبهگنی کل دوازده‌گانه‌است . مجدداً" ، چون الکترونها غیر هم‌ارزاند ، هیچکدام از حالتهای اتمی مذکور در فوق رد نمی‌شوند . به‌علت تبهگنی تصادفی ، آرایشهای $(1s^1, 2s^1)$ و $(1s^1, 2p^1)$ هردو دارای یک انرژی هستند ، در نتیجه حالتهای ^1S ، ^3S ، ^1P و ^3P همه دارای انرژی eV ۶۸ــ می‌باشند . وقتی نظریه پریشیدگی مرتبه‌اول به برهم‌کنش الکتروستاتیکی اعمال شود (فصل ۱۰) ، انرژیهای این

حالتها برحسب مقادیر L و S مربوطه‌شان جابه‌جا می‌شوند (شکل ۹ــ۵) . درفصل ۱۰ نشان خواهیم داد که اصل طرد پاولی به‌صورت یک قاعده (قاعدهٔ هاند[3]) باعث می‌شودکه ،برای یک آرایش معین ، حالتهای با چندگانگی بالاتر انرژی کمتری داشته باشند . در نتیجه ، در آرایش $(1s^1,2s^1)$ ، حالت ^3S انرژی کمتری از حالت ^1S دارد . هم‌چنین در آرایش $(1s^1,2p^1)$ ، حالت ^3P پائین تراز حالت ^1P قرار می‌گیرد (شکل ۹ ــ ۵) .



شکل (۹ــ۵) جابه‌جایی انرژی حالتهای اتمی ایده‌آل در هلیوم وقتی که‌برهم‌کنش الکترونی در نظر گرفته می‌شود .

هرچند بحث فوق مربوط به‌اتم هلیوم است ، روش مذکور می‌تواند به‌اتم Z الکترونی تعمیم داده شود . اگر پریشیدگی غالب برهم‌کنش الکتروستاتیکی باشد ، باید دترمینانهای اسلاتر را به‌ویژه حالتهای $\hat{\mathbf{L}}^{(T)} = \sum_{i=1}^{Z} \hat{\mathbf{L}}^{(i)}$ و $\hat{\mathbf{S}}^{(T)} = \sum_{i=1}^{Z} \hat{\mathbf{S}}^{(i)}$ پیوند دهیم .مدل‌برداری برای حالتهای جفت‌شده L–S منجر به‌محدودیتهای زیر در مقادیر L و S می‌شود .

$$\begin{aligned} &|\mathbf{l} + \mathbf{l}' + \mathbf{l}'' \cdots|_{\min} \leqslant L \leqslant (l + l' + l'' + \cdots) \\ &|\mathbf{s} + \mathbf{s}' + \mathbf{s}'' + \cdots|_{\min} \leqslant S \leqslant (s + s' + s'' + \cdots) \quad (s = s' = s'' = \cdots = \tfrac{1}{2}) \end{aligned} \qquad (۹ - ۵۰)$$

معنی جمله $|\ |_{\min}$ این است که بردارها طوری جمع می‌شوند که اندازه برآیند کمینه باشد . در نگاه اول چنین به‌نظر می‌رسد که وقتی عدد اتمی Z افزایش می‌یابد ، تعداد حالتهای

3- Hund

اتمی ممکن برای یک آرایش معین به‌طور هماهنگ افزایش می‌یابد . در واقع ، به‌خاطر اصل طرد پاولی ، بسیاری از حالتهای جفت‌شده که توسط مدل برداری پیش‌بینی می‌شوند غایبند. در واقع ، اتمها در حالت پایه معمولا" تعداد زیادی الکترون هم‌ارز دارند . می‌توان نشان داد که در یک آرایش داده شده تعداد زیر آرایشهای مغناطیسی که با اصل طرد پاولی سازگاراند با فرمول

$$\text{تبهگنی} = \frac{g!}{k!(g-k)!}$$

داده می‌شودکه در آن g تعداد حالتها در خارجی‌ترین زیر لایه پر نشده ، یعنی $2(2l+1)$ و k تعداد الکترونها در این زیر لایه‌است . بنابراین ، به‌عنوان مثال ، اگر اتمی درحالت‌پایه یک لایه خارجی کاملا" پر شده داشته باشد ، یعنی $g = k$ ، در این صورت آرایش ناتبهگن است و فقط می‌تواند به‌یک حالت ^1S ، همان‌طورکه درمورد هلیوم بود ،قرار گیرد .بنابراین تعداد حالتهای اتمی (جمله‌های طیفی) برای یک‌آرایش حالت پایه معین ،به‌وسیله‌خارجی‌ترین زیر لایه تعیین می‌شود . در جدول (۹ــ۱) جمله‌های طیفی ممکن را برای الکترونهای هم‌ارز s و p در یک زیر لایه خارجی نشان داده‌ایم . توجه کنیم که‌بعضی جملات ایجاد شده به‌وسیله مدل‌برداری ، به‌خاطر اصل طرد پاولی ، غایب هستند . هم‌چنین توجه کنیم که تبهگنی وابسته به‌زیر آرایشهای مغناطیسی برای یک آرایش $n-l$ داده شده برابر است با تبهگنی کل حالتهای اتمی که از طرحواره جفت‌شدگی L-S ایجاد شده‌اند . تبهگنی یک آرایش n-l در اتمهائی که زیر لایه خارجی آنها نیمه‌پر است بیشترین مقدار را دارد . در این مورد ، فرایند جفت‌شدگی پیچیده‌ترین است .

جدول (۹ــ۱)

حالتهای مجاز در طرحواره جفت‌شدگی L-S برای الکترونهای هم‌ارز در یک زیرلایه پرنشده خارجی

تبهگنی زیرآرایشهای مغناطیسی $\frac{g!}{k!(g-k)!}$	آرایش n-l	حالتهای اتمی (جملات طیفی) در طرحواره جفت‌شدگی L-S	تبهگنی حالتهای اتمی $\sum(2S+1)(2L+1)$
2	$(\cdots ns^1)$	^2S	2
1	$(\cdots ns^2)$	^1S	1
6	$(\cdots np^1)$	^2P	6
15	$(\cdots np^2)$	$^1S, {}^1D, {}^3P$	15
20	$(\cdots np^3)$	$^2P, {}^2D, {}^4S$	20
15	$(\cdots np^4)$	$^1S, {}^1D, {}^3P$	15
6	$(\cdots np^5)$	^2P	6
1	$(\cdots np^6)$	^1S	1

هم‌چنین ممکن است با ترکیب حالتهای $|ELSM_L M_S\rangle$ به‌ویژه حالتهای $\hat{J}^{(T)2} = |\hat{\mathbf{L}}^{(T)} + \hat{\mathbf{S}}^{(T)}|^2$ و $\hat{J}_Z^{(T)} = \hat{L}_Z^{(T)} + S_Z^{(T)}$ رسید . حالتهای اخیررا با $|ELSJM_J\rangle$ نمایش می‌دهیم . مدل برداری J را طبق $|L-S| \leqslant J \leqslant L+S$ ، با $|M_J| \leqslant J$ ، محدود می‌کند . هردو مجموعه حالتهای راسل ــ ساوندرز هستند و هردو پریشیدگی الکتروستاتیکی را قطری می‌کنند . ضرایب کلبش ــ گوردان برای این جفت‌شدگی از نظر شکل با ضرایبی که در مورد الکترون هیدرژنی به‌کاررفت یکسانند .اگر پریشیدگی ثانوی از آثار اسپین ــ مداری (میدانهای خارجی قوی وجود ندارند) ناشی شده باشد مجموعه انتخابی $|ELSJM_J\rangle$ است. برای نمایش این مطلب ازنظر طیف نمائی ، یک شاخص پائینی برای نمایاندن مقدار J اضافه می‌کنیم ، به‌عنوان مثال ، $|ELSJM_J\rangle = |E,2,1,3,M_J\rangle$ به‌صورت $^3D_3$ نوشته می‌شود .

برای اتمهای با عدد اتمی خیلی بالا نتیجه می‌شود که *پریشیدگیهای غالب* از آثار اسپین ــ مداری ناشی می‌شوند . در این صورت ، حالتهای اتمی راسل ــ ساوندرز $(L-S)$ پریشیدگی را قطری نمی‌کنند . برای اتمهای با Z بزرگ یک طرحواره جفت‌شدگی لازم است‌که به‌آن جفت‌شدگی $j-j$ می‌گویند . بحث جفت‌شدگی $j-j$ می‌تواند در هرکتاب درسی متعارفی در باره نظریه اتمی یافت شود*.

۱۰ــ گاز ایده‌آل کوانتومی

در نظریه جامدات ، مایعات و گازها تعداد ذرات سیستم معمولا" از مرتبه $\sim 10^{23}$ هستند . چون ذرات در جامدات و مایعات عموما" به‌طور شدید برهم‌کنش می‌کنند ، این سیستمها نمی‌توانند به‌عنوان سیستمهای ایده‌آل در نظر گرفته شوند . در مورد گازهای رقیق فاصله بین ذرات معمولا" آنقدر زیاد است که می‌توان آنها را ایده‌آل در نظر گرفت .با این وجود ، در بعضی موارد ، طبیعت تمیزناپذیری ذرات گاز نقش مهمی در رفتار ماکروسکوپیکی آن بازی می‌کند . به‌عنوان مثال ، ^4He (یک‌بوزون) در درجات حرارت پائین رفتاری کاملا" متفاوت از ^3He (یک فرمیون) دارد . چون این دو اتم ایزوتوپ یکدیگرند ، دارای خواص شیمیایی یکسانی می‌باشند . اختلاف در اسپین‌های هسته‌ای آنها منشاء رفتار ترمودینامیکی

---

* به‌عنوان مثال به‌کتاب زیر مراجعه کنید

E.U.Condon and G.H. Shortley, " The Theory of Atomic Spectra", Chapter X. Cambridge Univ. Press, London and New York, 1963.

کاملا" متفاوت آنهاست .

هامیلتونی مجموعه‌ای‌از ذرات تمیزناپذیر ایده‌آل در یک جعبه بزرگ به‌حجم $\mathscr{V}$ عبارت است از

$$\mathscr{H} = \sum_{q=1}^{N} \frac{\hat{p}^{(q)2}}{2m} + \mathcal{V}^{(q)} \quad , \quad \begin{array}{ll} \mathcal{V}^{(q)} = 0 & \text{در داخل} \\ \mathcal{V}^{(q)} = \infty & \text{در جای دیگر} \end{array} \qquad (۵۱-۹)$$

حالتهای تک‌ذره‌ای (بهنجارشده جعبه‌ای) و انرژیهای آنها عبارتنداز

$$\psi_{\mathbf{k},m_s} = \frac{1}{\sqrt{\mathscr{V}}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} |m_s\rangle \qquad \text{و} \qquad \varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \qquad (۵۲-۹)$$

که مقادیر مجاز بردار کوانتومی $\mathbf{k}$ به‌وسیله

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi}{\mathscr{V}^{1/3}} (n_x\mathbf{i} + n_y\mathbf{j} + n_z\mathbf{k}), \qquad n_x, n_y, n_z = \text{اعداد درست}$$

داده می‌شوند . حالتهای کل برای بوزونها حاصلضربهای متقارن شده‌ای به‌شکل

$$|\alpha\rangle = |\text{کلی}\rangle \to \frac{1}{(N!)^{1/2}} \mathscr{P}\psi_{\mathbf{k},m_s}(1)\psi_{\mathbf{k}',m_s'}(2)\cdots\psi_{\mathbf{k}(N),m_s(N)}(N) \qquad (۵۳-۹)$$

هستند . حالتهای فرمیونها می‌توانند برحسب دترمینانهای‌اسلاتر $N \times N$ به‌صورت

$$|\alpha\rangle = |\text{کلی}\rangle \to \frac{1}{(N!)^{1/2}} \begin{vmatrix} \psi_{\mathbf{k},m_s}(1) & \cdots & \psi_{\mathbf{k}(N),m_s(N)}(1) \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \psi_{\mathbf{k},m_s}(N) & \cdots & \psi_{\mathbf{k}(N),m_s(N)}(N) \end{vmatrix} \qquad (۵۴-۹)$$

نوشته‌شوند . برای کوتاه‌کردن نمادگذاریها در مسئله چندجسمی ، توجه کنیم که وقتی *اعداد اشغال* حالتهای تک ذره‌ای ، $n_{\mathbf{k},m_s}$، داده شده باشند می‌توانیم تابع حالت با تقارن مناسب را بسازیم . قرار می‌دهیم

$$|\alpha\rangle = |\{n_{\mathbf{k},m_s}\}\rangle$$

که در آن عدد کوانتومی $\alpha = \{n_{\mathbf{k},m_s}\}$ معرف دنباله‌ای از اعداد درست است که تعداد ذرات در حالت تک ذره‌ای $\psi_{\mathbf{k},m_s}$ را نشان می‌دهند . برای فرمیونها ، این محدودیت‌دیگر را داریم که $n_{\mathbf{k},m_s}$ باید یا یک باشد یا صفر (اصل طرد پاولی).انرژی‌کل‌گاز عبارت‌است‌از

$$E_\alpha = \sum_{\mathbf{k},m_s} n_{\mathbf{k},m_s}\varepsilon_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k},m_s} n_{\mathbf{k},m_s} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \qquad (۵۵-۹)$$

البته ، اعداد اشغال باید در رابطه

$$N = \sum_{\mathbf{k}, m_s} n_{\mathbf{k}, m_s} \qquad (۵۶-۹)$$

صدق کنند . در حالت پایه یک گاز بوزونی ایده‌آل ، هر ذره در حالت پائین‌ترین انـــرژی قرار دارد . از طرف دیگر ، یک گاز فرمی ایده‌آل ، نظیر الکترونها در یک فلز ،دارای یک‌ذره در هرکدام از N حالت پائین‌ترین انرژی است . پرانرژی‌ترین‌تراز اشغال شده در حالت‌پایه تراز فرمی نامیده می‌شود .

۱۱ ــ نمایش N ، عملگر چگالی ، آمار کوانتومی

یک آرایش داده شده $\{n_{\mathbf{k}, m_s}\}$ از یک سیستم چندذره‌ای‌می‌تواندبه‌وسیله انرژی‌سیستم $E_\alpha = \sum n_{\mathbf{k}, m_s}\varepsilon_{\mathbf{k}}$ و تعداد کـل ذرات آن ، $N = \sum n_{\mathbf{k}, m_s}$ ، نمایش داده شود .از نمادگذاری زیر (برای سیستمهای ایده‌آل) استفاده خواهیم کرد

$$|E_\alpha, N\rangle = |\alpha\rangle = |\{n_{\mathbf{k}, m_s}\}\rangle \qquad (۵۷-۹)$$

کت $|E_\alpha, N\rangle$ معرف یک حالت با انرژی E_α و تعداد N ذره است . این تراز شدیدا" تبهگـن است زیرا عموما" می‌توان در حالی که انرژی و تعداد کل ذرات ثابت می‌مانند اعداد اشغال را جابه‌جا کرد . توجه کنیم که وقتی ذرات برهم‌کنش می‌کنند آرایش طرف راست بـی‌معنـی می‌شود . انرژی و تعداد کل ذرات در طرف چپ (۹ــ۵۷) بازهم کاملا" معین هستنـد ولـی دیگر به‌وسیله (۹ــ۵۵) و (۹ــ۵۶) داده نمی‌شوند .

برای کاربردهای بسیاری کافی است که N را به‌عنوان یک پارامتر ثابت در نظر بگیریم . اما در مواردی که N پایسته نباشد،باید به‌آن‌به‌عنوان یک‌عددکوانتومی نگاه‌کنیم‌وگذارهای بین حالتهای با N متفاوت را در نظر بگیریم . به‌عنوان مثال ، در فرایندهای با انرژی بـالا که ذرات به‌وجود می‌آیند یا از بین می‌روند ، N ثابت نیست . یک دلیل روشن‌تر برای‌اینکه N به‌عنوان یک متغیر (نمایش N) در نظر گرفته شود این است که به‌آسانی در نظریه‌مکانیک آماری‌کوانتومی مورد استفاده قرارمی‌گیرد.حالتهای $|E_\alpha, N_\alpha\rangle$ اکنون به‌عنوان ویژه حالتهـای $\mathscr{H}$ و $\hat{N}$ در نظر گرفته می‌شوند ، یعنی ،

$$\begin{aligned} \mathscr{H}|E_\alpha, N_\alpha\rangle &= E_\alpha|E_\alpha, N_\alpha\rangle \\ \hat{N}|E_\alpha, N_\alpha\rangle &= N_\alpha|E_\alpha, N_\alpha\rangle \end{aligned} \qquad (N_\alpha = 0,1,2,\ldots) \qquad (۵۸-۹)$$

اگر سیستم چند جسمی در یکی از ویژه‌حالتهای خود ، $|E_\alpha, N_\alpha\rangle$ ، باشد مقدار قابل انتظار یک عملگر چندجسمی (مثلا" ، عملگر انرژی جنبشی)

$$\hat{A} = \hat{A}(\hat{\mathbf{p}}^{(1)}\hat{\mathbf{p}}^{(1)}, \ldots \hat{\mathbf{p}}^{(N_\alpha)}, \hat{\mathbf{p}}^{(N_\alpha)})$$

می‌تواند به‌صورت

$$\langle\hat{A}\rangle_\alpha = \langle E_\alpha, N_\alpha|\hat{A}|E_\alpha, N_\alpha\rangle \qquad (۵۹-۹)$$

محاسبه شود .وقتی مشخص باشدکه سیستم در یکی‌از ویژه‌حالتهای خود قرار دارد،می‌گوئیم که سیستم در یک حالت "خالص" است .

درعمل ،غالبا"با یک حالت "مخلوط" سروکار داریم وتنها یک شناخت آماری‌ازسیستم داریم . اطلاعات آماری دارای طبیعت ترمودنامیکی است و به‌وسیله یک تابع توزین W_α که وزن ترمودینامیکی نسبی‌یافتن سیستم در حالت $|E_\alpha, N_\alpha\rangle$ را می‌دهد ،نمایش داده می‌شود . متوسط ترمودینامیکی با استفاده از

$$\bar{A}_{\text{therm}} = \sum_\alpha W_\alpha\langle E_\alpha, N_\alpha|\hat{A}|E_\alpha, N_\alpha\rangle \qquad (۶۰-۹)$$

به‌دست می‌آید . به‌یک معنا ، ما متوسط حرارتی توزین شدهٔ مقادیر قابل انتظار کوانتومی‌را محاسبه می‌کنیم . طرحواره‌ای از این نوع متوسط مجموعه‌ای نامیده می‌شود و ، از ملاحظات احتمالاتی ، انتظار داریم که توابع توزین مجموعه‌ای بهنجار شده باشند ، یعنی

$$\sum_\alpha W_\alpha = 1$$

محتملا" مهمترین تابع توزین مجموعه‌ای (چگالی) متعلق به‌مجموعه بندادی بزرگ‌است که به‌وسیله

$$W_\alpha = \frac{e^{(\mu N_\alpha - E_\alpha)/k_B T}}{\sum_\alpha e^{(\mu N_\alpha - E_\alpha)/k_B T}} \qquad (k_B = \text{ثابت بولتزمن}) \qquad (۶۱-۹)$$

تعریف می‌شود . مخرج طوری انتخاب شده است که چگالی مجموعه‌ای بهنجارشده باشد . پارامترهای μ (پتانسیل شیمیائی) و T (دمای کلوین)حالت ترمودینامیکی سیستم‌را مشخص می‌کنند .وقتی پتانسیل شیمیایی ودمای سیستم معلوم باشند ، متوسط ترمودینامیکی‌هرعملگر چندجسمی می‌تواند با استفاده از

$$\bar{A}(\mu, T) = \frac{\sum_\alpha e^{(\mu N_\alpha - E_\alpha)/k_B T} \langle E_\alpha, N_\alpha | \hat{A} | E_\alpha, N_\alpha \rangle}{\sum_\alpha e^{(\mu N_\alpha - E_\alpha)/k_B T}} \qquad (۶۲-۹)$$

محاسبه شود . متوسط فوق می‌تواند در یک شکل فشرده‌تری به‌صورت

$$\bar{A}(\mu, T) = \frac{\mathrm{Tr}\hat{\rho}\hat{A}}{\mathrm{Tr}\hat{\rho}} \qquad (۶۳-۹)$$

بیان شود که در آن عملگر چگالی مجموعهٔ بندادی بزرگ عبارت است از

$$\hat{\rho} = e^{(\mu \hat{N} - \hat{\mathcal{H}})/k_B T}$$

چون رد عبارت از حاصل‌جمع عناصر قطری (در هر پایه) است ، نتیجه می‌گیریم

$$\begin{aligned} \mathrm{Tr}\, \hat{\rho}\hat{A} &= \sum_\alpha \langle E_\alpha, N_\alpha | e^{(\mu \hat{N} - \hat{\mathcal{H}})/k_B T} \hat{A} | E_\alpha, N_\alpha \rangle \\ &= \sum_\alpha e^{(\mu N_\alpha - E_\alpha)/k_B T} \langle E_\alpha, N_\alpha | \hat{A} | E_\alpha, N_\alpha \rangle \end{aligned}$$

و

$$\mathrm{Tr}\, \hat{\rho} = \sum_\alpha \langle E_\alpha, N_\alpha | e^{(\mu \hat{N} - \hat{\mathcal{H}})/k_B T} | E_\alpha, N_\alpha \rangle = \sum_\alpha e^{(\mu N_\alpha - E_\alpha)/k_B T}$$

معادلات (۹-۶۳) و (۹-۶۲) در واقع یکسان‌اند . البته ، برای محاسبهٔ متوسط حرارتی در (۹-۶۲) باید نخست مسئله چندجسمی را حل کنیم و هرکدام از مقادیر قابل انتظار $\langle E_\alpha, N_\alpha | \hat{A} | E_\alpha, N_\alpha \rangle$ را پیدا کنیم .

بدون اثبات ذکر می‌کنیم که برای سیستمهای بدون برهم‌کنش ایده‌آل متوسط روی حالتهای ، $|E_\alpha, N_\alpha\rangle$ ، چند جسمی به‌متوسط روی حالتهای تک‌ذره‌ای به‌شکل

$$\bar{A}(\mu, T) = \sum_{\mathbf{k}, m_s} \bar{n}_{\mathbf{k}, m_s}(\mu, T) \langle \mathbf{k}, m_s | \hat{A} | \mathbf{k}, m_s \rangle \qquad (۶۴-۹)$$

تقلیل پیدا می‌کند . در اینجا ، $\langle A \rangle_{\mathbf{k}, m_s}$ عبارت است از مقدار قابل انتظار یک عملگر یک‌جسمی در یک حالت تک‌ذره‌ای و $\bar{n}_{\mathbf{k}, m_s}(\mu, T)$ در اصل یک متوسط حرارتی اعداد اشغال است . این اعداد اشغال متوسط به‌وسیله روابط* (رک مسئله ۹-۸)

---

* برای ذرات تمیزپذیر ، $\bar{n}$ به‌وسیله توزیع کوانتومی بولتزمن

$$\bar{n}_{\mathbf{k}, m_s} = e^{\mu/k_B T} e^{-\varepsilon_{\mathbf{k}}/k_B T}$$

داده می‌شود . برای بدست‌آوردن آن ، به‌عنوان مثال ، به‌کتاب

←

(توزیع بوز ــ اینشتین برای بوزونهای تمیزناپذیر)

$$\bar{n}_{\mathbf{k},m_s} = \frac{1}{e^{(\varepsilon_k-\mu)/k_BT}-1} \qquad (۹ــ۶۵ \text{ الف})$$

(توزیع فرمی ــ دیراک برای فرمیونهای تمیزناپذیر)

$$\bar{n}_{\mathbf{k},m_s} = \frac{1}{e^{(\varepsilon_k-\mu)/k_BT}+1} \qquad (۹ــ۶۵ \text{ ب})$$

داده می‌شوند .

انرژی و تعداد ترمودینامیکی ذرات به‌ترتیب عبارتنداز

$$\bar{E}(\mu, T) = \sum_{\mathbf{k},m_s} \bar{n}_{\mathbf{k},m_s}\langle \mathbf{k}, m_s|\mathscr{H}|\mathbf{k}, m_s\rangle = \sum_{\mathbf{k},m_s} \bar{n}_{\mathbf{k},m_s}\frac{\hbar^2k^2}{2m} \qquad (۹ــ۶۶)$$

و

$$\bar{N}(\mu, T) = \sum_{\mathbf{k},m_s} \bar{n}_{\mathbf{k},m_s} \qquad (۹ــ۶۷)$$

در عمل ، ذرات در یک جعبه بزرگ قرار دارند و $\mathbf{k}$ شبه پیوسته می‌شود . حاصل‌جمع می‌تواند ، با استفاده از (۵ــ۱۶) ، به‌وسیله یک انتگرال جایگزین شود ، که می‌دهد

$$\sum_{\mathbf{k},m_s} \to \Gamma_s \int \frac{d\mathbf{k}\mathscr{V}}{(2\pi)^3} = \Gamma_s \int \frac{d\mathbf{p}\mathscr{V}}{h^3} \qquad \left(\mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar}\right) \qquad (۹ــ۶۸)$$

ضریب تبهگنی اسپینی $\Gamma_s = 2s+1$ برای الکترون $(s = \frac{1}{2})$ برابر است با ۲ . متوسطهای حرارتی مشاهده‌پذیرهای مستقل از اسپین به‌شکل $\hat{A}(\hat{\mathbf{p}})$ شکل زیر را به‌خود می‌گیرند

$$\bar{A}(\mu, T) = \Gamma_s \frac{\mathscr{V}}{h^3} \int \bar{n}(\mathbf{p})A(\mathbf{p})\, d\mathbf{p}$$

J. Kestin and J.R. Dorfman, "A Course in Statistical Thermodynamics" PP. 343-349, Academic Press, New York,1971.

یا به‌کتاب

C. Kittel, "Elementary Statistical Physics" P. 86, Wiley, New York, 1958.

مراجعه کنید .

که در آن

$$\bar{n}(\mathbf{p}) = \frac{1}{e^{(p^2/2m-\mu)/k_B T} \pm 1}$$

به‌عنوان مثال ، انرژی و تعداد ترمودینامیکی ذرات در (۹ــ۶۶) و (۹ــ۶۷) می‌شوند

$$\bar{E}(\mu, T) = \Gamma_s \frac{\mathscr{V}}{h^3} \int \bar{n}(\mathbf{p}) \frac{p^2}{2m} d\mathbf{p} \quad (\text{تمام فضای } \mathbf{p}) \qquad (\text{۹ــ۶۹ الف})$$

و

$$\bar{N}(\mu, T) = \Gamma_s \frac{\mathscr{V}}{h^3} \int \bar{n}(\mathbf{p}) d\mathbf{p} \quad (\text{تمام فضای } \mathbf{p}) \qquad (\text{۹ــ۶۹ ب})$$

باید مخصوصا" در موقع جایگزین‌کردن حاصل جمع به‌وسیله انتگرال برای بوزونهای در دمای پائین دقت‌کنیم . نزدیک صفر مطلق ، اغلب ذرات بوزون سعی دارند که حالتهای تک ذره‌ای در مجاورت $\mathbf{k} = 0$ را اشغال نمایند . این حالتها حتی برای حجمهای بزرگ شبه پیوسته نمی‌شوند و بنابراین نمی‌توان به‌جای حاصل جمع از یک انتگرال استفاده کرد . در واقع ، در زیر یک دمای بحرانی T_0 ، ذرات سریعا" حالت پایه $\mathbf{k} = 0$ را اشغال می‌کنند. این پدیده به‌تراکم‌اینشتینی معروف است (شکل ۹ــ۶) . چون برای فرمیونها اصل طردپاولی مانع این "تجمع " در مجاورت $\mathbf{k} = 0$ می‌شود،این‌تراکم درمورد الکترونها دیده نمی‌شود. از (۹ــ۶۹)آشکار است که متوسطهای حرارتی بستگی به‌حجم گاز دارند و بایدبه‌صورت

$$\bar{E} = \bar{E}(\mu, T, \mathscr{V} \qquad \text{و} \qquad \bar{N} = \bar{N}(\mu, T, \mathscr{V})$$

نوشته شوند . هم‌چنین از (۹ــ۶) روشن است که در $T = 0$ توزیع فرمی دیراک در هر حالت زیر تراز فرمی* یک الکترون دارد و در حالتهای با انرژی بالاتراز ε_F هیچ الکترونی ندارد . بنابراین تراز فرمی به‌وسیله تعداد فرمیونها در سیستم ، یا به‌طور معادل به‌وسیله چگالی ذرات معین می‌شود . برای ربط‌دادن ε_F به‌چگالی ، (۹ــ۶۹ ب) را به‌صورت

$$\frac{\bar{N}}{\mathscr{V}} = \rho = \frac{\Gamma_s}{h^3} \int \bar{n}(\mathbf{p}) d\mathbf{p} \qquad (\Gamma_s = 2) \qquad (۹ - ۷۰)$$

می‌نویسیم که (در $T = 0$)

---

* انرژی فرمی با پتانسیل شیمیائی در $T = 0$ برابر است ، یعنی ، $\varepsilon_F = \mu|_{T=0}$.

$$\bar{n}(\mathbf{p}) = 1, \qquad |\mathbf{p}| \leqslant p_F \qquad \left(\frac{p_F{}^2}{2m} = \varepsilon_F\right)$$
$$\bar{n}(\mathbf{p}) = 0, \qquad |\mathbf{p}| > p_F$$

با تبدیل انتگرال به‌مختصات کروی ، (۹ــ۷۰) خواهد شد

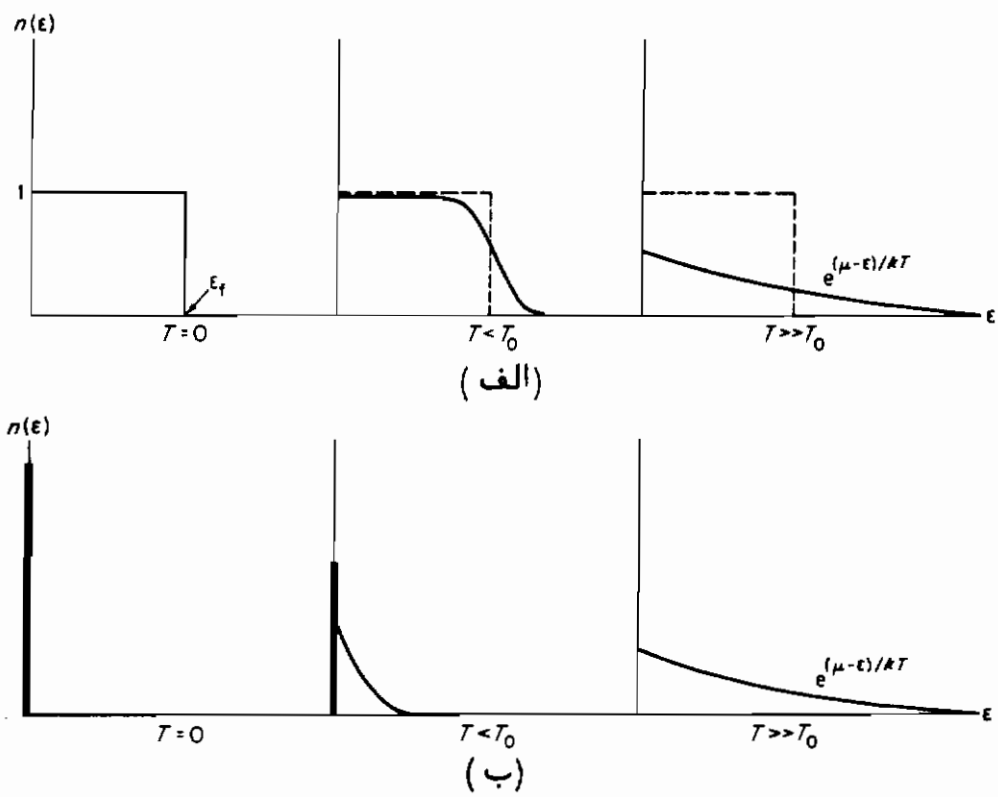
$$\rho = \frac{2}{h^3}\int_0^{p_F} 4\pi p^2\, dp = \frac{8\pi}{3h^3} p_F{}^3$$

تکانهٔ فرمی عبارت است از

$$p_F = \left(\frac{3h^3}{8\pi}\rho\right)^{1/3} \qquad \text{(۹ــ۷۱ الف)}$$

با استفاده از $p_F = (2m\varepsilon_F)^{1/2}$ ، انرژی فرمی می‌شود

$$\varepsilon_F = 3^{2/3}\pi^{4/3}\frac{\hbar^2}{2m}\rho^{2/3} \qquad \text{(۹ــ۷۱ ب)}$$



شکل (۹ــ۶) توزیع (الف) فرمی ــ دیراک و (ب) بوزــ اینشتین برای‌دماهای گوناگون . T_0 عبارت است از دمای تبهگنی داده شده در معادله (۹ــ۷۳) .

به‌طور خلاصه ، مشاهده می‌کنیم که تفاوت اصلی بین مسائل چندجسمی ایده‌آل کلاسیکی و کوانتومی از آثار همبستگی آماری سرچشمه می‌گیرد . این آثار در تابع توزیع آماری یک ذره‌ای

$$\bar{n}_k = \frac{1}{e^{(\varepsilon_k-\mu)/k_B T} \pm 1} \qquad (۹-۷۲)$$

منعکس شده‌اند . جمله ± 1 در (۹–۷۲) ، که از این همبستگیها ناشی می‌شود و در آمار ذرات تمیزپذیر وجود ندارد ، روی رفتار ترمودینامیکی فرمیونها و بوزونها تاثیر می‌گذارد . وقتی فاصله متوسط بین ذرات تمیزپذیر در مقایسه با متوسط طول موجهای دوبروی آنها بزرگ می‌شود ، انتظار داریم که این ذرات تا اندازه‌ای تمیزپذیری فضائی کسب کنند . اگر فرض کنیم که انرژی متوسط یک ذره در یک گاز $\bar{\varepsilon} \sim \pi k_B T$ باشد ، داریم

$$\bar{\lambda} = \frac{h}{\bar{p}} = \frac{h}{(2m\bar{\varepsilon})^{1/2}} \simeq \frac{h}{(2\pi m k_B T)^{1/2}}$$

فاصله بین ذره‌ای به‌طور تقریب با $d = 1/\rho^{1/3}$ داده می‌شود . در نتیجه ، انتظار داریم وقتی که

$$\bar{\lambda} \ll d, \qquad \frac{h}{(2\pi m k_B T)^{1/2}} \ll \frac{1}{\rho^{1/3}}$$

یا

$$T_0 \ll T \qquad , \qquad \left(T_0 = \frac{\rho^{2/3} h^2}{2\pi m k_B} \right) \qquad (۹-۷۳)$$

باشد ذرات تقریبا" تمیزپذیر بشوند . به‌طور معادل ، توزیعهای فرمی ــ دیراک و بوز ــ اینشتین باید ، وقتی دما خیلی بالاتر از دمای تبهگنی T_0 است ، به‌توزیع بولتزمن $e^{(\mu-\varepsilon_k)/kT_B}$ تقلیل یابند . در واقع ، همان‌طور که از شکل (۹–۶) دیده می‌شود ، نیز همین‌طور است . از طرف دیگر ، در زیر این دما آثار کوانتومی غلبه می‌کنند . برای فرمیونها ، سیستم تقریبا" در حالت پایه است . برای بوزونها ، شروع تراکم اینشتینی را مشاهده می‌کنیم .

برای سیستمهای رقیق ، چگالی پائین است و T_0 در (۹–۷۳) خیلی نزدیک به صفر مطلق است . از طرف دیگر ، گاز الکترون آزاد در یک فلز دارای $۱۰^{۲۳} \sim$ ذره بر cm^3 است . دمای تبهگنی متناظر $T_0 \sim 10{,}000°\ K$ است به‌طوری که حتی در دمای اطاق بیشتر الکترونهای یک فلز اصولا" پائین‌ترین حالتهای مجاز ، به‌وسیله اصل طرد پاولی ، را اشغال می‌کنند .

بحث ما تا اینجا اصولا" روی سیستمهای ایده‌آل متمرکز شده بود . وقتی برهم‌کنشها

منظور شوند ، یک جواب دقیق ، به‌جز در موارد نادر ، غیرممکن است . قدرت و برد نسبی برهم‌کنشهایی که از نظر فیزیکی جالب‌اند غالبا" امکان یک بررسی مستقیم پریشیدگی را رد می‌کنند . در فصل ۱۰ ، بعضی از روشهایی را که در بررسی سیستمهای ذرات حقیقی مفید تشخیص داده شده‌اند ، گسترش خواهیم داد .

مسائل

۹ـ۱ (الف) مجموعه‌ای از N ذره ، که‌جرم هرکدام m_i است و تحت تاثیر پتانسیل خارجی $V_i(\mathbf{r})$ قرار دارد ، در نظر بگیرید . برهم‌کنش بین ذرات می‌تواند به‌صورت $V_{ij} = V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$ نوشته شود . هامیلتونی سیستم و معادلات هامیلتونی حرکت را برای ذره i ام بنویسید .

(ب) هامیلتونی مکانیک کوانتومی را در مکانیک موجی بنویسید و نشان دهید که وقتی برهم‌کنشها نادیده گرفته شوند ، معادله شرودینگر به‌معادلات تک ذره‌ای تفکیک می‌شود .

۹ـ۲ دو ذره (m_1 و m_2) بدون برهم‌کنش در یک پتانسیل نوسانگر یک بعدی $V = \frac{1}{2}Kx^2$ و در یک حالت اسپینی در نظر بگیرید .

(الف) یک عبارت عمومی برای انرژیهای کوانتیده سیستم پیدا کنید .

(ب) اگر ذرات تمیزپذیر باشند ، یعنی $m_1 \neq m_2$ ، ویژه تابعهای متناظر $\psi_{n,n'}(x_1, x_2)$ را پیدا کنید .

(ج) قسمت (ب) را برای موردی که در آن ذرات فرمیونهای تمیزناپذیر باشند ($m_1 = m_2$) تکرار کنید . برای بوزونها نیز تکرار کنید .

(د) با استفاده از قسمت (ج) احتمال یافتن ذرات با فاصله معین $x = x_2 - x_1$ را وقتی که سیستم در حالت $n = 0$ ، $n' = 1$ باشد پیدا کنید . این عمل را هم برای بوزونها و هم برای فرمیونها انجام دهید .

۹ـ۳ (الف) با استفاده از (۹ـ۱۷) نشان دهید که اثر عملگر جایگشت $\hat{P}^{(qt)}$ روی یک ویژه کت مکانی عبارت است از

$$\hat{P}^{(qt)}|\mathbf{r}^{(1)} \cdots \mathbf{r}^{(q)}, \mathbf{r}^{(t)} \cdots \mathbf{r}^{(N)}\rangle = |\mathbf{r}^{(1)} \cdots \mathbf{r}^{(t)}, \mathbf{r}^{(q)} \cdots \mathbf{r}^{(N)}\rangle$$

(ب) با استفاده از قسمت (الف) نشان دهید که اگر $|\alpha^S\rangle$ و $|\alpha^A\rangle$ ویژه حالتهای

$\hat{p}^{(qt)}$ با ویژگی

$$\hat{p}^{(qt)}\,|\alpha^S\rangle = |\alpha^S\rangle, \qquad \hat{p}^{(qt)}\,|\alpha^A\rangle = -\,|\alpha^A\rangle$$

باشند ویژه تابعهای متناظر دارای ویژگی زیر هستند .

$$\Psi_\alpha{}^S(1, 2, \ldots, q, t, \ldots, N) = \Psi_\alpha{}^S(1, 2, \ldots, t, q, \ldots, N)$$
$$\Psi_\alpha{}^A(1, 2, \ldots, q, t, \ldots, N) = -\,\Psi_\alpha{}^A(1, 2, \ldots, t, q, \ldots, N)$$

(راهنمائی: از روشهای ارائه شده در فصل ۴ برای پاریته استفاده کنید)

۹ــ۴ (الف) تبهگنی وابسته به‌یک آرایش (1s, 3d) در هلیوم را پیدا کنید و حالتهای جفت‌شده L–S را بنویسید . آیا در این آرایش الکترونها هم‌ارزاند ؟

(ب) تحقیق کنید که‌تبهگنی جمله‌های طیفی با تبهگنی آرایش برابر است .

۹ــ۵ (الف) تبهگنی وابسته به‌یک آرایش $(1s^2, 2s^2, 2p^3)$ ، (یعنی ، حالت پایه‌اتم ازت) را پیدا کنید .

(ب) حالتهای اتمی ممکن L–S را برای این آرایش پیداکنید . (راهنمائی: از جدول ۹ــ۱ استفاده کنید)

(ج) جمله طیفی متناظر با حالت پایه می‌تواند با استفاده از قواعد (هاند) زیر به‌دست آیند :

(۱) برای یک آرایش معین ، جمله با بزرگترین چندگانگی (بالاترین مقدار S) از نظر انرژی پائین‌ترین است .

(۲) برای این چندگانگی جمله با بزرگترین مقدار L از نظر انرژی پائین‌ترین‌است .

از جملات به‌دست‌آمده در (ب) جمله طیفی حالت پایه را برای اتم ازت پیدا کنید.

۹ــ۶ یک الکترون منفرد که در یک چاه کروی بینهایت به‌شعاع R ، یعنی، $V=0$ برای $r \leqslant R$ و $V = \infty$ برای جاهای دیگر ، قرار دارد در نظر بگیرید .

(الف) عبارتهایی برای ویژه تابعها وانرژیهای حالت پایه و اولین حالت برانگیخته در مختصات کروی پیدا کنید .

(ب) سپس فرض کنید که دو الکترون در این چاه محبوس‌اند . با صرفنظرکردن‌از برهم‌کنشهای‌کولنی ، دترمینانهای اسلاتر (شامل اسپین) و ویژه مقدارهای‌انرژی‌متناظر با حالت پایه و اولین حالت برانگیخته سیستم را پیدا کنید .

(ج) با درنظر گرفتن برهم‌کنش‌کولنی به‌عنوان پریشیدگی غالب ، حالت پایه و اولین حالت برانگیخته جفت‌شده L–S را پیدا کنید وعبارتهای‌مربوط به‌جابجایی مرتبه‌اول

در انرژی این حالتها را بنویسید . (راهنمائی: روش انجام‌شده در اتم هلیوم‌رادنبال کنید)

۹ــ۷ دریکی‌ازآرایشهای یک سیستم سه‌ذره‌ای ، یک الکترون در هرکدام از حالتهای مداری زیر وجود دارد

$$\psi_1 = N_1 \exp - m_1{}^2 r_1{}^2; \qquad \psi_2 = N_2 \sin m_2 r_2; \qquad \psi_3 = N_3 \exp - m_3 r_3$$

که در آنها m_i جرم ذرات و N_i ثابت بهنجارش است .

(الف) اگر سه‌ذره تمیزپذیر باشند (یعنی ، $m_1 \neq m_2 \neq m_3$) ،تابع حالت‌کل‌سیستم را بسازید .

(ب) اگر ذرات تمیزناپذیر باشند (یعنی $m_1 = m_2 = m_3$) ، تابع حالتهای با تقارن زوج و فرد را بسازید .

۹ــ۸ (الف) معادله (۹ــ۶۲)می‌تواند به‌تعداد ترمودینامیکی ذرات$\bar{N}$،باقراردادن$\hat{A} = \hat{N}$ اعمال شود .نشان دهید که $\bar{N}$ می‌تواند به‌صورت

$$\bar{N} = k_B T \frac{\partial}{\partial \mu} \ln \sum_\alpha \exp\left[\frac{(\mu N_\alpha - E_\alpha)}{k_B T}\right]$$

نوشته شود . (راهنمائی: $\hat{N}|E_\alpha, N_\alpha\rangle = N_\alpha|E_\alpha, N_\alpha\rangle$)

(ب) برای سیستمهای *ایده‌ال* داریم $N_\alpha = \sum_i n_i$ و $E_\alpha = \sum_i n_i \varepsilon_i$ که‌درآن n_i و ε_i به ترتیب اعداد اشغال و انرژیهای حالتهای تک‌ذره‌ای هستند . نشان دهید که نتیجه فوق به‌شکل

$$\bar{N} = k_B T \frac{\partial}{\partial \mu} \ln \sum_{\{n_i\}} \prod_i \exp\left[\frac{n_i(\mu - \varepsilon_i)}{k_B T}\right]$$

در می‌آید که در آن جمع‌بندی روی تمام آرایشهای ممکن صورت می‌گیرد .

(ج) با عوض‌کردن جای جمع و ضرب نشان دهید که نتیجه فوق شکل

$$\bar{N} = \sum_i \bar{n}_i$$

را به‌خود می‌گیرد که در آن

$$\bar{n}_i = \frac{1}{\exp[(\varepsilon_i - \mu)/k_B T] \pm 1}$$

علامت فوقانی اشاره به‌فرمیونها دارد . (راهنمائی: برای فرمیونها محدودیت $n_i = 0,1$ را داریم)

۹ـ۹ یک ستاره نوترونی ستاره‌ای است که از نظر نوترونی دارای چگالی $10^{14}\,gm/cm^3$ است. دمای تبهگنی‌را برای چنین ستاره‌ای پیدا کنید . اعتقاد براین است که دمای‌ستارگان نوترونی خیلی پائین‌تر از دمای تبهگنی است . در باره توزیع نوترونی چه می‌توانید بگوئید ؟

مراجع پیشنهادی

Borowitz, S., "Fundamentals of Quantum Mechanics." Benjamin, New York, 1967.

Condon, E. U., and Shortley, G. H., "The Theory of Atomic Spectra," Chapter VI. Cambridge Univ. Press, London and New York, 1963.

Heitler, W., "Elementary Wave Mechanics," Chapter V. Oxford Univ. Press, London and New York, 1956.

Kestin, J., and Dorfman, J. R., "A Course in Statistical Thermodynamics," Chapter 8. Academic Press, New York, 1971.

Kittel, C., "Elementary Statistical Physics," pp. 86–102. Wiley, New York, 1958.

Merzbacher, E., "Quantum Mechanics," 2nd ed., Chapter 18. Wiley, New York, 1970.

Pauling, L., and Wilson, E. B., "Introduction to Quantum Mechanics," Chapter VIII. McGraw-Hill, New York, 1935.

Sommerfeld, A., "Thermodynamics and Statistical Mechanics," Section 37. Academic Press, New York, 1964.

۱۰

سیستمهای چند ذره‌ای برهم کنش کننده

وقتی دریک سیستم چند ذره‌ای برهم‌کنشها نادیده‌گرفته شوند ، ذرات هویت سینماتیکی خود را محفوظ نگاه می‌دارند و ، به‌جز برای آثار تبادلی وابسته به‌تمیزناپذیری ، ناهمبسته باقی می‌مانند . در سیستمهای واقعی ، که برهم‌کنشها نقش مهمی بازی می‌کنند ، معادله شرودینگر چندذره‌ای دیگر تفکیک‌پذیر نیست . در نتیجه ، مسئله چندجسمی به N مسئله یک جسمی تقلیل پیدا نمی‌کند و تصور ذرات تک از نظر مکانیک کوانتومی معنی خود را از دست می‌دهد .

گاهی‌اوقات ممکن‌است یک‌تبدیل بندادی به‌یک مجموعه جدیدی‌ازمختصات و تکانه‌ها طوری انجام داد که هامیلتونی جدید دیگر صریحا" برهم‌کنشهای دوجسمی را در بر نداشته باشد .وقتی برهم‌کنشها را به‌این طریق "دور" می‌کنیم ،به‌مفهوم شبه ذراتی هدایت می‌شویم که به‌هرکدام ازآنها یکی از متغیرهای بندادی جدید وابسته است . شبه ذرات یک سیستم ایده‌آل تشکیل می‌دهند و می‌توانند با استفاده از روش ارائه شده در فصل پیش موردبررسی قرار گیرند . البته مفهوم فیزیکی این شبه ذرات نیاز به‌تعبیر خاصی دارد ، اما با استفاده‌از تبدیل وارون همیشه‌می‌توانیم خواص آنها رابه‌خواص ذرات اصلی ربط دهیم . به‌عنوان‌مثال نشان خواهیم داد که تبدیل به‌مختصات بهنجار ، وقتی به‌مجموعه‌ای از جرمهای نقطه‌ای که توسط فنرهائی به‌هم وابسته شده‌اند اعمال شود ، یک هامیلتونی جدید ایجاد می‌کند که معرف یک گاز ایده‌آل از شبه ذرات به‌نام فونون* است . می‌توان نشان داد که هر فونون

---

* به‌طور دقیقتر ، عبارت شبه‌ذره به‌موردی اطلاق می‌شود که در آن ارتباطی با ذره اصلی وجود داشته باشد . فونونها ، در واقع ، متناظر با وضعیتی هستند که در آن یک گروه‌از ←

(کوانتای ارتعاش کشسانی) یک بوزون است. به‌علاوه، این فونونها می‌توانند ایجاد شوند یا از بین بروند.

این طرز بررسی مسئله چندجسمی موکول به‌پیداکردن تبدیل بندادی مناسب است. درغیراین‌صورت، روشهای تقریبی، نظیر نظریه پریشیدگی، روشهای وردشی، و غیره، باید به‌کار گرفته شوند.

به‌عنوان یک نقطه شروع، مسئله دوذره را بررسی خواهیم کرد و تبدیلی ارائه‌خواهیم کرد که همیشه آنرا قابل حل کند.

۱ــ مسئله دوجسمی منزوی

اتم هیدرژن (پروتون به‌اضافه الکترون) مثال مهمی‌از یک مسئله دوجسمی منزوی (بدون نیروی خارجی) است. در این مورد ذرات از طریق نیروهای کولنی برهم‌کنش می‌کنند. در بحث قبلی‌مان ازهیدرژن (فصل ۵) فرض‌کردیم که هسته ساکن می‌ماند. وقتی حرکت هسته در نظر گرفته شود، معادله شرودینگر به‌شکل

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^{(1)2}-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^{(2)2}-\frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(2)}-\mathbf{r}^{(1)}|}\right\}\Psi_\alpha(\mathbf{r}^{(1)},\mathbf{r}^{(2)})=E_\alpha\Psi_\alpha(\mathbf{r}^{(1)},\mathbf{r}^{(2)}) \qquad (۱-۱۰)$$

در می‌آید که در آن M جرم پروتون، m جرم الکترون، $\mathbf{r}^{(1)}$ مختصه پروتون و $\mathbf{r}^{(2)}$ مختصه الکترون است.

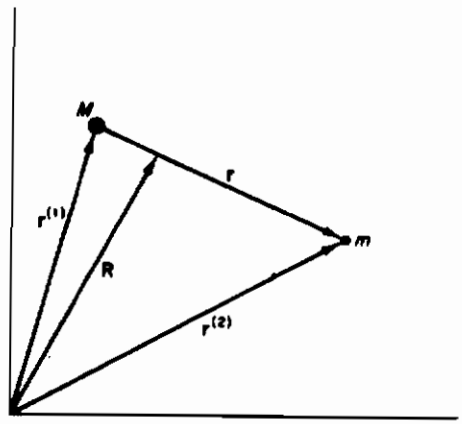
چون این ذرات تمیزپذیراند $(M \neq m)$، انتظار داریم که $\Psi_\alpha(\mathbf{r}^{(1)},\mathbf{r}^{(2)})$ تحت عمل تعویض ۲ ⟵ ۱ نه متقارن باشد نه پاد متقارن. معادله (۱۰ــ۱)، به‌صورتی که هست، تفکیک‌پذیر به‌یک قسمت‌الکترونی ویک قسمت پروتونی‌نیست. برای اینکه به‌شکل‌قابل‌تفکیکی برسیم تبدیل به‌مرکز جرم (c.m.) را به‌صورت (شکل ۱۰ــ۱)

$$\mathbf{R}=\frac{M\mathbf{r}^{(1)}+m\mathbf{r}^{(2)}}{M+m} \qquad \text{(بردار مرکز جرم)}$$

$$\mathbf{r}=\mathbf{r}^{(2)}-\mathbf{r}^{(1)} \qquad \text{(بردار نسبی)}$$

ذرات برانگیخته شده‌اند و لذا "برانگیختگی تجمعی" نامیده می‌شود. با این وجود، عبارت شبه ذره را با معنی رقیقتری برای فونونها به‌کار خواهیم برد.

وارد می‌کنیم .



شکل (۱۰–۱) بردار مرکز جرم R و بردار نسبی r برای یک سیستم دوجسمی .

با استفاده از این تبدیل ، (۱۰–۱) بعداز قدری ساده‌سازی خواهد شد

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2(M+m)}\nabla^{(\mathbf{R})2}-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^{(\mathbf{r})2}-\frac{e^2}{r}\right\}\Psi_\alpha(\mathbf{R},\mathbf{r})=E_\alpha\Psi_\alpha(\mathbf{R},\mathbf{r}) \qquad (۱۰–۲)$$

که در آن

$$\mu=\frac{mM}{M+m}=\frac{m}{1+m/M} \qquad \text{(جرم کاهش یافته سیستم)}$$

کمیت $|\Psi_\alpha(\mathbf{R},\mathbf{r})|^2$ نمایانگر چگالی احتمال یافتن اتم هیدرژن در وضعیتی‌است‌که مرکز جرم آن در نقطه R در فضا و فاصله الکترون ــ پروتون r باشد .چون این مسئله دوذره‌ای‌شش درجه آزادی (بدون در نظر گرفتن اسپین) دارد ، انتظارداریم‌که نماد α معرف یک‌مجموعه شش عدد کوانتومی باشد .

با به‌کاربردن یک جواب آزمایشی به‌شکل $\Psi_\alpha=\xi_{\mathbf{k}}(\mathbf{R})\psi_i(\mathbf{r})$ ، نتیجه می‌گیریم که (۱۰–۲) به‌صورت زیر تفکیک می‌شود

$$-\frac{\hbar^2}{2(M+m)}\nabla^{(\mathbf{R})2}\xi_{\mathbf{k}}(\mathbf{R})=\varepsilon_{\mathbf{k}}^{(\text{c.m.})}\xi_{\mathbf{k}}(\mathbf{R}) \qquad (۱۰-۳)$$

و

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^{(\mathbf{r})2}-\frac{e^2}{r}\right\}\psi_i(\mathbf{r})=\varepsilon_i^{(\text{int})}\psi_i(\mathbf{r}) \qquad (۱۰-۴)$$

با

$$E_\alpha = \varepsilon_{\mathbf{k}}^{(\mathrm{c.m.})} + \varepsilon_i^{(\mathrm{int})}$$

که در آن $\varepsilon_i^{(\mathrm{int})}$ معرف انرژی داخلی اتم است. این تفکیک تنها درصورتی عملی است که سیستم منزوی باشد، یعنی، نیروهای خارجی حضور نداشته باشند. معادله مرکز جرمی (۱۰–۳) با معادله یک ذره آزاد هم‌ارز است و نشان‌دهندهٔ یک انتقال خالص است. طیف پیوسته است و داریم

$$\xi_{\mathbf{k}} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}, \qquad \varepsilon_{\mathbf{k}}^{(\mathrm{c.m.})} = \frac{\hbar^2 k^2}{2(M+m)}$$

چون قسمت انتقالی روی رفتار داخلی تاثیر نمی‌کند، در موقع محاسبه ترازهای کوانتیده هیدرژنی می‌توان از آن صرفنظر کرد. معادله دوم (۱۰–۴) حاکم بر رفتار کوانتومی حرکت نسبی ذرات است و طبیعت طیف داخلی اتم را تعیین می‌کند. به‌جز برای جایگذاری

$$m \to \mu = \frac{m}{1 + m/M}$$

معادله (۱۰–۴) با معادله (۵–۱) در فصل ۵ یکسان است. در نتیجه، انتظار داریم که ویژه جوابها به‌شکل

$$\psi_i = \psi_{nlm_l} = R_{nl}(r) Y_{lm_l}(\theta, \phi)$$

و

$$\varepsilon_i^{(\mathrm{int})} = \varepsilon_n = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2 n^2}$$

باشند. گذارهای بین این ترازها منجر به‌یک طیف گسیلی می‌شود که اصولاً با طیفی که با ساکن‌بودن پروتون به‌دست می‌آید مشابه است، تنها تفاوت در این است که ثابت ریدبرگ، به‌جای m، شامل μ است. تصحیحات مربوط به‌جرم کاهش یافته در هیدرژن، با اینکه فقط از مرتبه $m/M \sim \frac{1}{2} \times 10^{-3}$ هستند، توسط طیف نماهای با قدرت تفکیک زیاد مشاهده شده‌اند. در واقع، می‌توان طیفهای گسیلی هیدرژن و دوتریوم (که در هسته آن یک پروتون و یک نوترون وجود دارد) را از یکدیگر تمیز داد، تفاوت طیفها از تفاوت نسبت m/Mها نتیجه می‌شود.

متاسفانه هیچکس هنوز تبدیلی پیدا نکرده است که بتواند به‌مسئله عمومی سه‌جسمی

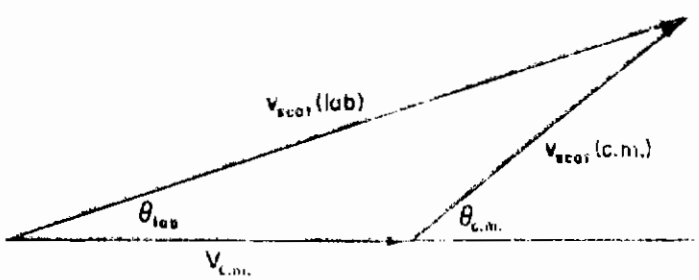
اعمال شود . بنابراین ، به‌عنوان مثال ، برای اتم هلیوم (هسته به‌اضافه دوالکترون) ،جواب دقیقی وجود ندارد .

۲ـ پراکندگی از یک هدف متحرک

تحلیل فرایند پراکندگی‌که درفصل ۸ ارائه شد محدود به‌مسائلی بودکه هدف در حین برخورد ساکن می‌ماند . در واقع وقتی جرم هدف نسبت به‌جرم پرتابه خیلی بزرگ باشد عقب‌نشینی هدف کوچک است . از طرف دیگر ، اگر جرمهای هدف و پرتابه در یک حدود باشند ، حرکت هدف مهم است و یک مسئله پراکندگی دوجسمی داریم .

مسئله پراکندگی دوجسمی‌می‌تواند با استفاده‌ازتبدیل به‌مرکزجرم حل شود . اگرفرایند پراکندگی‌از یک دستگاه محورهای مختصات که با مرکز جرم حرکت می‌کند (دستگاه مرکزجرمی) مشاهده شود ، زاویه پراکندگی مشاهده شده درست همانند موردی است که جرم هدف ، M ، ثابت باشد وجرم پرتابه m به‌وسیله جرم کاهش یافته $\mu = [m/(1 + m/M)]$ جایگزین شود. زاویه پراکندگی $\theta_{c.m}$ و مقطع موثر $\sigma_{c.m}$ در دستگاه مختصات c.m ، می‌توانند با استفاده‌از روشهای ارائه شده در فصل ۸، با گذاردن μ به‌جای m ، محاسبه شوند .

ازبخت بد نظریه پردازها ،داده‌های تجربی پراکندگی نسبت به‌دستگاه مختصاتی‌تهیه شده‌اند که در آزمایشگاه ساکن است . مقطع موثر آزمایشگاهی σ_{lab} از این جهت با $\sigma_{c.m}$ تفاوت داردکه زاویه‌های پراکندگی در دو دستگاه مختصات با یکدیگر متفاوتند* (شکل ۱۰ـ۲).



شکل (۱۰ـ۲) استفاده از رابطه $v_{scat}(lab) = v_{scat}(c.m.) + V_{c.m.}$ برای نشان‌دادن رابطه بین Θ_{lab} و $\Theta_{c.m.}$.

---

* در دهه اخیر تجربیات "باریکه‌های برخوردکننده"ای که در آن جرمهای مساوی با سرعتهای برابر و متقابل به‌یکدیگر برخورد می‌کنند توسعه یافته است . در اینجا ، دستگاههای مرکز جرمی و آزمایشگاهی بر یکدیگر منطبق می‌شوند .

تعداد ذرات پراکنده شده در داخل یک زاویه حجمی معین باید ، بدون توجه به‌دستگاه مختصات به‌کاربرده شده ،یکی باشد .برای مسائل پراکندگی با نیروی مرکزی ، این‌عددعبارت است از

$$dN = I_0\,\sigma_{\text{c.m.}}\,d\Omega_{\text{c.m.}} = I_0\,\sigma_{\text{lab}}\,d\Omega_{\text{lab}}$$

که از آن نتیجه می‌شود

$$\sigma_{\text{lab}} = \sigma_{\text{c.m.}}\frac{d\Omega_{\text{c.m.}}}{d\Omega_{\text{lab}}} = \frac{\sin\theta_{\text{c.m.}}}{\sin\theta_{\text{lab}}}\frac{d\theta_{\text{c.m.}}}{d\theta_{\text{lab}}}\,\sigma_{\text{c.m}} \qquad (۱۰-۵)$$

که در آن $\sigma_{\text{c.m.}} = |f(\theta_{\text{c.m.}})|^2$

وقتی رابطه بین $\theta_{\text{c.m}}$ و θ_{lab} معلوم شد ، مقطع موثر در مرکز جرم (که از طریق نظری به‌دست‌می‌آید) می‌تواند به‌مقطع موثر آزمایشگاهی (که به‌طور تجربی به‌دست می‌آید)تبدیل شود . رابطه هندسی بین این زوایا در شکل (۱۰-۲) ، که از آن‌رابطه

$$\tan\theta_{\text{lab}} = \frac{v_{\text{scat}}(\text{c.m.})\sin\theta_{\text{c.m.}}}{v_{\text{scat}}(\text{c.m.})\cos\theta_{\text{c.m.}} + V_{\text{c.m.}}} \qquad (۱۰-۶)$$

حاصل می‌شود ، نشان داده شده است . اگر هدف در آغاز ساکن باشد سرعتهای اولیه‌پرتابه از دید دستگاههای مختصات مرکز جرمی و آزمایشگاهی به‌وسیله

$$v_0(\text{c.m.}) = \frac{\mu}{m}\,v_0(\text{lab})$$

به‌یکدیگر مربوط می‌شوند . به‌علاوه ، چون انرژی در دستگاه‌مختصات مرکز جرمی پایسته‌است داریم

$$v_0(\text{c.m.}) = \frac{\mu}{m}\,v_0(\text{lab}) = v_{\text{scat}}(\text{c.m.}) \qquad (۱۰-۷)$$

سرعت مرکز جرم می‌تواند به‌وسیله

$$(M+m)\mathrm{V}_{\text{c.m.}} = m v_0(\text{lab}) \quad \text{یا} \quad \mathrm{V}_{\text{c.m.}} = \frac{\mu}{M}\,v_0(\text{lab}) \qquad (۱۰-۸)$$

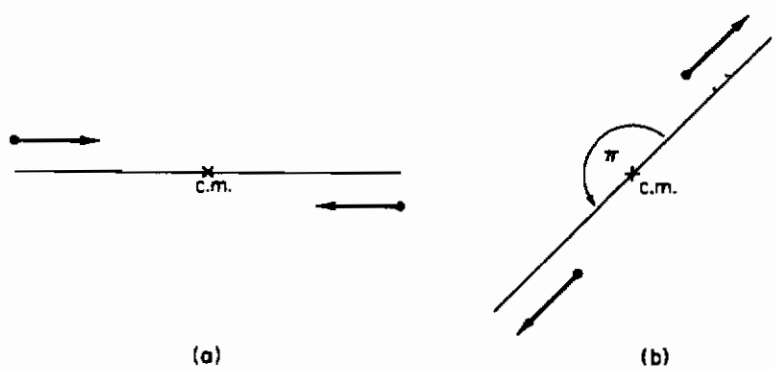
بیان شود . با به‌کاربردن (۱۰ــ۷) و (۱۰ــ۸) در (۱۰ــ۶) ، بالاخره خواهیم داشت

$$\tan \theta_{\text{lab}} = \frac{\sin \theta_{\text{c.m.}}}{\cos \theta_{\text{c.m.}} + (m/M)}$$

که رابطه مورد نظر بین زاویه‌ها است (مسئله ۱۰ــ۳ الف) . توجه کنیم که وقتی $m/M \to 0$ دو زاویه ، و در نتیجه دومقطع موثر ، همان‌طور که انتظار می‌رفت ،یکسان می‌شوند .

دربالا فرض کردیم که ذرات تمیزپذیراند (یعنی ، $M \neq m$) .اما ،اگر دوذره تمیزناپذیر باشند ، $\sigma_{\text{c.m}}$ باید تقارن تبادلی مناسب‌را منعکس نماید . اگر جرمها یکسان باشند ، وقتی‌از دستگاه مختصات c.m آنهارا مشاهده کنیم ، به‌نظر می‌رسد که با سرعتهای مساوی و مختلف الجهت به‌یکدیگر نزدیک می‌شوند . برای اینکه تکانه پایسته باشد ، باید با سرعتهای مساوی ومتقابل پراکنده شوند (شکل ۱۰ــ۳) .درنتیجه ،هدفها تحت زاویه 180° نسبت به‌پرتابه‌ها عقب‌نشینی می‌کنند* دامنه‌های پراکندگی برای هدف و پرتابه به‌وسیله

$$f_{\text{target}}(\pi - \theta_{\text{c.m.}}) = f_{\text{projectile}}(\theta_{\text{c.m.}})$$



شکل (۱۰ــ۳) سینماتیک (الف) قبل و (ب) بعداز برخورد دوجسم در دستگاه مقایسه مرکز جرمی

به‌یکدیگر مربوط می‌شوند . اما ، اگر هدف و پرتابه بوزونهای بدون اسپین تمیزناپذیر باشند، مقطع موثرکل باید متقارن شده و به‌شکل زیر باشد**

---

* برای پراکندگی دوجسمی ، پایستگی تکانه همواره ایجاب می‌کند که ذرات پراکنده شده ، در دستگاه مختصات c.m تحت زاویه 180° نسبت به‌یکدیگر حرکت کنند ، حتی وقتی $m \neq M$ باشد .

** در این رابطه باید جرم کاهش یافته $\mu = \frac{1}{2}m$ به‌کار رود .

$$\begin{aligned}\sigma_{\text{c.m.}} &= |f_{\text{tot}}(\theta_{\text{c.m.}})|^2 = |f(\theta_{\text{c.m.}}) + f(\pi - \theta_{\text{c.m.}}|^2 \\ &= |f(\theta_{\text{c.m.}})|^2 + |f(\pi - \theta_{\text{c.m.}})|^2 + 2\,\text{Re}\, f(\theta_{\text{c.m.}}) f(\pi - \theta_{\text{c.m.}})\end{aligned} \qquad (۹-۱۰)$$

دوجمله اول درطرف راست با استدلالات کلاسیکی‌موردانتظار هستند .چون ذرات‌یکسان‌اند، مقطع موثرکلاسیکی‌کل‌از نو طوری تعریف می‌شودکه عقب‌نشینی هدفها را در برداشته‌باشد. اما جمله سوم صرفا" مکانیک کوانتومی است و ناشی از آثار تبادلی است .

اگر ذرات α را بوزونهای بدون‌اسپین فرض‌کنیم ،مقطع موثرمرکز جرمی‌برای پراکندگی α–α می‌تواند مستقیما" محاسبه شود . با استفاده از نتایج راترفورد ، (۸–۱۴) ، که عبارت است از

$$f(\theta) = -\frac{\Gamma(1+i\gamma)}{\Gamma(1-i\gamma)}\frac{\gamma}{k}\frac{\exp(-i\gamma \ln \sin^2\theta/2)}{2\sin^2\theta/2}$$

(۱۰–۹) پس از قدری محاسبات جبری طولانی می‌شود

$$\sigma_{\text{c.m.}} = \left(\frac{Z^2e^2}{4\varepsilon}\right)^2 \left(\frac{1}{\sin^4\theta/2} + \frac{1}{\cos^4\theta/2} + \frac{2\cos\gamma(\ln\tan^2\theta/2)}{\sin^2\theta/2\cos^2\theta/2}\right)$$

(۱۰ – ۱۰) (در پراکندگی α–α داریم $Z = 2$)

که در آن $\gamma = Z^2e^2\mu/\hbar(2\mu\varepsilon)^{1/2}$. دوجمله اول در طرف راست شامل h نیستند و از طریق کلاسیکی نیز به‌دست می‌آیند . جمله سوم جمله تبادلی است* (پراکندگی‌مات[1]) و ماهیت‌آن کاملا" مکانیک کوانتومی است .

برای فرمیونهای با اسپین نیمه‌درست (به‌عنوان مثال ، پراکندگی الکترون ــ الکترون)، پراکندگی ممکن‌است یا درحالت یگانه ($S = 0$) یادرحالت سه‌گانه ($S = 1$) رخ‌دهد. این‌حالتها به‌ترتیب دارای قسمتهای فضائی متقارن و پاد متقارن می‌باشند (رک ۹–۴۹) . اگر باریکه ناقطبیده باشد ، با توزین هرحالت ($S = 0$ یا $S = 1$) به‌وسیله چندگانگی آن ، یک مقطع موثر متوسط ایجاد می‌کنیم ، یعنی ،

---

* وقتی $h \to 0$ $(\gamma \to \infty)$ صورت با تغییر θ سریعا" نوسان می‌کند و غیرقابل‌اندازه‌گیری می‌شود . جمله تبادلی قابل اغماض می‌شود و نتیجه کلاسیکی به‌دست می‌آید .

1- Mott

$$\bar{\sigma}_{\text{c.m.}} = \tfrac{1}{4}|f(\theta) + f(\pi-\theta)|^2 + \tfrac{3}{4}|f(\theta) - f(\pi-\theta)|^2$$
$$= |f(\theta)|^2 + |f(\pi-\theta)|^2 - \text{Re}\, f(\theta)f(\pi-\theta) \qquad \text{(فرمیونهای با اسپین } \tfrac{1}{2}\text{)}$$
$$(۱۰-۱۱)$$

هم (۱۰ــ۹) و هم (۱۰ــ۱۱) هردو می‌توانند ،سرانجام ، با استفاده از (۱۰ــ۵) ، به‌دستگاه مختصات آزمایشگاهی تبدیل شوند .

۳ــاتم هلیوم ــبررسی به‌روش پریشیدگی

درفصل ۹ به‌این نتیجه رسیدیم که حالتهای مرتبه صفر مناسب برای اتم هلیوم‌ایده‌آل باید به‌شکل $|E_\alpha LSM_L M_S\rangle$ باشند . با استفاده از روشهای پریشیدگی فصل ۷ ، تصحیحات مرتبه اول انرژی به‌وسیله

$$E_{\alpha LS} = E_\alpha + \langle E_\alpha LSM_L M_S | \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(2)} - \mathbf{r}^{(1)}|} | E_\alpha LSM_L M_S\rangle$$
$$= -54\left(\frac{1}{n^2} + \frac{1}{n'^2}\right) + \int d\mathbf{r}^{(1)}\, d\mathbf{r}^{(2)} \Psi^*_{E_\alpha LSM_L M_S}(\mathbf{r}^{(1)}, \mathbf{r}^{(2)}) \left[\frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(2)} - \mathbf{r}^{(1)}|}\right]$$
$$\times \Psi_{E_\alpha LSM_L M_S}(\mathbf{r}^{(1)}, \mathbf{r}^{(2)}) \qquad (۱۰-۱۲)$$

داده‌می‌شوند .چون پریشیدگی فقط متغیرهای فضائی را درگیر می‌کند ، قسمت اسپینی‌بهنجار شده $\Psi_{E_\alpha L_L SML_S}$ در انتگرال برابر با یک است و در محاسبات زیر می‌تواند نادیده‌گرفته شود .

تصحیح انرژی در حالت پایه ^1S $(n = n' = 1)$ هلیوم ، با استفاده از (۹ــ۴۸) ،می‌دهد

$$E_{\alpha 00} = -108 + \int d\mathbf{r}^{(1)}\, d\mathbf{r}^{(2)} \psi^*_{100}(\mathbf{r}^{(1)})\psi^*_{100}(\mathbf{r}^{(2)}) \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(2)} - \mathbf{r}^{(1)}|}$$
$$\times \psi_{100}(\mathbf{r}^{(1)})\psi_{100}(\mathbf{r}^{(2)})$$

توابع مداری توابع هیدرژن مانند هستند ، یعنی ،

$$\psi_{100}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} e^{-Zr/a} \qquad (Z = 2)$$

و می‌توان نشان داد که انتگرال فوق برابر است با $\Delta E \sim 34$ eV . انرژی حالت پایه که تا تقریب مرتبه اول تصحیح شده است (شکل ۱۰ـ۴) عبارت است از

$$E_{a00} = -108 + 34 = -74 \quad \text{eV} \qquad (\text{حالت پایه})$$

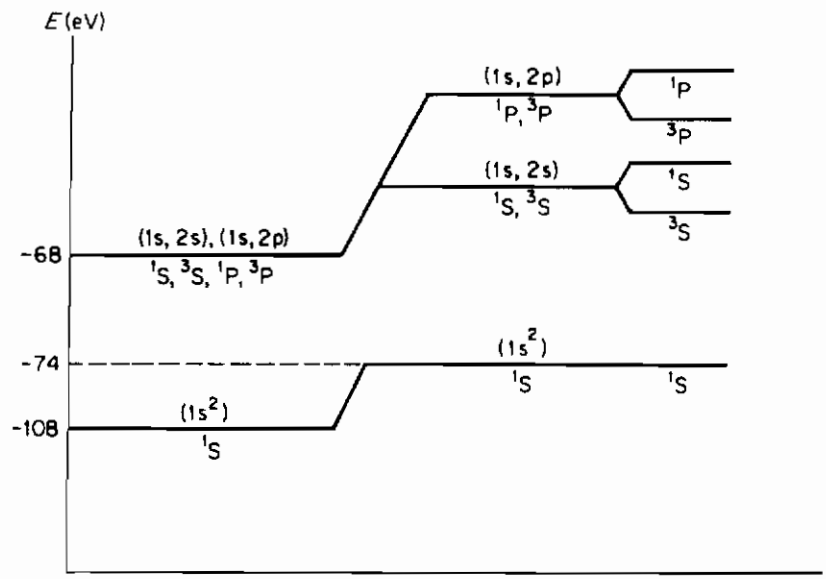
انرژی یونش اول هلیوم می‌شود

$$E_{\text{ion}} = E_{100} - E_{a00} = -54 - (-74) = 20 \quad \text{eV}$$

این مقدار به‌طور قابل قبولی با مقدار مشاهده شده 24 eV~می‌خواند . اما اندازه نسبی جابه‌جایی انرژی عبارت است از

$$\left|\frac{\Delta E}{E_a}\right| \simeq \frac{34}{108} \simeq 0.3$$

که مقدار قابل ملاحظه‌ای است ، در نتیجه اعتبار نظریه پریشیدگی به‌صورتی که ارائه شد هم چنان مورد سئوال باقی می‌ماند .



برهم‌کنش‌تبادلی + برهم‌کنش مستقیم + بدون‌برهم‌کنش

شکل (۱۰ـ۴) جابه‌جاییهای انرژی حالتهای اتمی ایده‌آل در هلیوم وقتی برهم‌کنش الکترونی در نظر گرفته می‌شود .

جابه‌جاییهای مربوط به‌حالتهای برانگیخته اول ^1S و ^3S به‌طریق مشابهی به‌دست می‌آیند. با استفاده از (۹ـ۴۹) ، این جابه‌جاییها به‌صورت‌زیر به‌دست‌می‌آیند

$$\Delta E = \tfrac{1}{2}\int d\mathbf{r}^{(1)}\, d\mathbf{r}^{(2)}\{\psi^*_{100}(\mathbf{r}^{(1)})\psi^*_{200}(\mathbf{r}^{(2)}) \pm \psi^*_{100}(\mathbf{r}^{(2)})\psi^*_{200}(\mathbf{r}^{(1)})\}$$
$$\times \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(2)} - \mathbf{r}^{(1)}|}\{\psi_{100}(\mathbf{r}^{(1)})\psi_{200}(\mathbf{r}^{(2)}) \pm \psi_{100}(\mathbf{r}^{(2)})\psi_{200}(\mathbf{r}^{(1)})\}$$

که علامت بالائی برای ^1S و علامت پائینی‌برای ^3S است . جابه‌جاییهای انـرژی می‌توانند به‌صورت زیر تجزیه شوند

$$\Delta E = \tfrac{1}{2}\int d\mathbf{r}^{(1)}\, d\mathbf{r}^{(2)}\, \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(2)} - \mathbf{r}^{(1)}|}\{|\psi_{100}(\mathbf{r}^{(1)})|^2\, |\psi_{200}(\mathbf{r}^{(2)})|^2$$
$$+ |\psi_{100}(\mathbf{r}^{(2)})|^2\, |\psi_{200}(\mathbf{r}^{(1)})|^2\} \qquad \text{(انتگرال مستقیم)}$$

$$\pm \tfrac{1}{2}\int d\mathbf{r}^{(1)}\, d\mathbf{r}^{(2)}\, \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(2)} - \mathbf{r}^{(1)}|}\{2\,\mathrm{Re}\,\psi^*_{100}(\mathbf{r}^{(1)})\psi^*_{200}(\mathbf{r}^{(2)})$$
$$\times \psi_{100}(\mathbf{r}^{(2)})\psi_{200}(\mathbf{r}^{(1)})\} \qquad \text{(انتگرال تبادلی)}$$

انتگرال مستقیم نشان می‌دهد که هردو حالت برانگیخته اول (^1S و ^3S)به‌علت‌دافعه‌کولنی الکترونها جابه‌جا می‌شوند . انتگرال تبادلی مثبت‌برای‌حالت ^1S یک‌جابه‌جایی‌ثانوی‌به‌طرف بالا برای این حالت نشان می‌دهد . انتگرال تبادلی منفی برای حالت ^3S نشان می‌دهد که حالت سه‌گانه قدری به‌طرف پائین جابه‌جا می‌شـود. برای‌تعمیم، مشاهده می‌کنیم‌که‌انتگرال مستقیم یک انتقال بسته به‌مقدار L ایجاد می‌کند . به‌علاوه ، بسته به‌اینکه حالت مـورد نظر دارای ماهیت یگانه یا سه‌گانه باشد ، یک شکافتگی دیگر هم رخ می‌دهد . برای یک آرایـش معین حالت سه‌گانه همیشه در زیر حالت یگانه قرار دارد*.

شکافتگی حالتهای یگانه و سه‌گانه می‌تواند براساس اصل طرد پاولی‌توضیح داده شود . به‌خاطرآوریم‌که در دترمینان اسلاتری که‌حالت یگانه $S=0$ را می‌سازد ذرات دارای اسپینهای مختلف‌الجهت می‌باشند . قسمت فضائی متقارن است و همبستگی‌های دافعه وجود ندارند . ذرات می‌توانند نزدیک یکدیگر قرار داشته باشند و انرژی برهم‌کنشی مثبت می‌تواند بزرگ باشد . از طرف دیگر ، حالت $S = 1$ شامل دترمینانهای اسلاتری با اسپینهای هم‌جهت است . دافعه‌های آماری وابسته به‌قسمت فضائی پاد متقارن‌الکترونها را دور از یکدیگر نگاه می‌دارد

---

* تعمیم این اصل به‌اتمهای چندالکترونی به‌نام قاعده‌هاند موسوم است . بنابه‌این قاعـده هرچه چندگانگی‌اسپینی بالاتر باشد (برای یک آرایش ثابت) انرژی پائین‌تر است (رک مسئله ۹ــ۵) .

و بنابراین انرژی برهم‌کنشی مثبت را کاهش می‌دهد . بنابراین حالت ^3S $(S=1)$ در زیر حالت ^1S $(S=0)$ قرار می‌گیرد .

برهم‌کنش الکتروستاتیکی تبهگنی را به‌طور کامل از بین نمی‌برد زیرا انرژی پریشیده در (۱۰–۱۲) هنوز از M_L و M_S مستقل است . در نتیجه هر ترکیب خطی از این زیر حالتهای مغناطیسی هنوز ویژه حالت مرتبه صفر مناسب انرژی برای هامیلتونی الکتروستاتیکی هلیوم است . چون این هامیلتونی با عملگر $\hat{\mathbf{J}}^{(T)} = \hat{\mathbf{L}}^{(T)} + \hat{\mathbf{S}}^{(T)}$ جابه‌جاپذیر است ، قادر خواهیم بود ویژه حالتهای انرژی را به‌صورت

$$|E_\alpha LSJM_J\rangle = \sum_{M_L, M_S} C_{M_L, M_S} |E_\alpha LSM_L M_S\rangle \qquad (۱۰-۱۳)$$

با خواص

$$\hat{J}^{(T)^2} |E_\alpha LSJM_J\rangle = J(J+1)\hbar^2 |E_\alpha LSJM_J\rangle \qquad (|L-S| \leqslant J \leqslant L+S)$$

و

$$\hat{J}_Z^{(T)} |E_\alpha LSJM_J\rangle = M_J \hbar |E_\alpha LSJM_J\rangle \qquad (|M_J| \leqslant J)$$

بسازیم .

به‌بیان دیگر ، هم‌دسته حالتهای $|M_L M_S\rangle$ و هم دسته حالتهای $|JM_J\rangle$ پریشیدگی الکتروستاتیکی را قطری می‌کنند . اگر میدانهای خارجی غایب باشند ، پریشیدگی غالب (بعداز برهم‌کنش الکتروستاتیکی) ناشی از آثار ساختار ریز است .مجموعه مرتبه‌صفرصحیح عبارتست از $|JM_J\rangle$ ، و انرژیهای مرتبه اول مربوطه وابستگی به J را نشان می‌دهند . اگر یک میدان ضعیف $\mathbf{B}$ وارد شود ، در ترازها بسته به‌مقدار M_J یک جابه‌جایی (اثر غیرعادی زیمن ۷–۵۷) مشاهده می‌کنیم .

اگر یک میدان قوی $\mathbf{B}$ به‌اتم هلیوم اعمال شود ، جمله‌های ساختار ریز در هامیلتونی می‌توانند نادیده گرفته شوند و حالتهای مرتبه صفر به‌شکل $|M_L M_S\rangle$ هستند .جابه‌جاییهای ترازها ، طبق الگوی پاشن ــ باک (۶–۳۸) به M_L و M_S بستگی دارند .

برای متمایزکردن حالتهای $|E_\alpha LSM_L M_S\rangle$ از حالتهای $|E_\alpha LSJM_J\rangle$ ، یک شاخص پائین (مقدار J) به‌نماد طیف نمائی اخیر اضافه می‌کنیم . به‌عنوان مثال ، ^3P معرف حالت $|E_\alpha 1, 1, M_L M_S\rangle$ است در حالی که $^3P_2$ معرف حالت $|E_\alpha 1, 1, 2, M_J\rangle$ می‌باشد .

قواعد گزینش برای گذارهای دوقطبی تابشی در اتمهای جفت شده L–S شبیه به‌قواعدی هستند که‌درفصل ۷برای هیدرژن به‌دست‌آمد ،یعنی، $\Delta S = 0$ و $\Delta L = 0, \pm 1$ ، با $\Delta J = 0, \pm 1$ اما $J = 0 \to J = 0$ ممنوع است . قاعده $\Delta S = 0$ بخصوص جالب است زیرا

ایجاب می‌کند که فقط گذارهای یگانه به‌یگانه $(S=0 \to S=0)$ یا سه‌گانه به‌سه‌گانه $(S=1 \to S=1)$ در تقریب دوقطبی امکان‌پذیر باشند. اگر هلیوم در اولین حالت برانگیخته سه‌گانه خود، ^3S، باشد نمی‌تواند از طریق یک گذار دوقطبی به‌حالت پایه خود، ^1S، باز گردد. بنابراین اولین حالت برانگیخته سه‌گانه یک حالت فراپایدار (شدیدا" پایدار) است. یک گاز مرکب از اتمهای هلیوم می‌تواند به‌عنوان یک سیستم دومولفه‌ای در نظرگرفته شود. اتمهائی که در حالتهای سه‌گانه و در حالتهای یگانه هستند به‌ترتیب *ارتو ــ هلیوم* و *پاراهلیوم* را تشکیل می‌دهند. هرکدام از این زیر سیستمها از نظر طیف نمائی از دیگری متمایز است.

قبلا" دیدیم که برهم‌کنشهای الکتروستاتیکی بین الکترونها در هلیوم تصحیحات قابل ملاحظه‌ای در ترازهای ایده‌آل (هیدرژن مانند) ایجاد می‌کنند. با اینکه تصحیحات مرتبه اول انرژی با تجربه سازگاراند، هیچ دلیلی وجود ندارد که قبول کنیم نظریه پریشیدگی مرتبه بالاتر وضعیت را بهتر می‌کند. در واقع، سری پریشیدگی حتی ممکن است همگرا نشود. خوشبختانه روشهای دیگری وجود دارد که بررسی اتمهای حقیقی را میسر می‌سازند وبه‌نتایج متناهی منجر می‌شوند. این روشها در زیر مورد بحث قرار خواهند گرفت.

۴ــ اتم هلیوم ــ یک روش وردشی

روش وردشی با موفقیت بزرگی (هیلراس[2]، ۱۹۳۰) در محاسبهٔ انرژیهای اتم هلیوم به‌کار گرفته شده است. مطلب را با درنظرگرفتن تابع آزمایشی یک پارامتری به‌شکل

$$\Psi_{\text{trial}}(\alpha, \mathbf{r}^{(1)}, \mathbf{r}^{(2)}) = \frac{\alpha^3}{\pi a^3} \exp\left(-\frac{\alpha(r^{(1)} + r^{(2)})}{a}\right) \qquad \left(a = \frac{\hbar^2}{me^2}\right) \qquad (۱۴-۱۰)$$

شروع می‌کنیم. این تابع آزمایشی اساسا" حاصل‌ضربی از توابع هیدرژن مانند است که‌درآن پارامتر وردشی α است. انتگرال وردشی (با استفاده از هامیلتونی هلیوم) عبارت‌است از

$$I(\alpha) = \int d\mathbf{r}^{(1)}\, d\mathbf{r}^{(2)} \Psi^*_{\text{trial}}(\alpha, \mathbf{r}^{(1)}, \mathbf{r}^{(2)}) \left\{ -\frac{\hbar^2 \nabla^{(1)2}}{2m} - \frac{\hbar^2 \nabla^{(2)2}}{2m} - \frac{2e^2}{r^{(1)}} - \frac{2e^2}{r^{(2)}} + \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(2)} - \mathbf{r}^{(1)}|} \right\} \Psi_{\text{trial}}(\alpha, \mathbf{r}^{(1)}, \mathbf{r}^{(2)})$$

2- Hilleraas

$$= \langle T_1 \rangle + \langle T_2 \rangle + \langle V_1 \rangle + \langle V_2 \rangle + \langle V_{12} \rangle$$

از انتگرالها نتیجه می‌شود

$$\langle T_1 \rangle = \langle T_2 \rangle = -\alpha^2 \varepsilon_1$$
$$\langle V_1 \rangle = \langle V_2 \rangle = 4\alpha\varepsilon_1 \qquad \left(\varepsilon_1 = \frac{-me^4}{2\hbar^2} = -13.6 \text{ eV}\right)$$
$$\langle V_{12} \rangle = -\tfrac{5}{4}\alpha\varepsilon_1$$

با مشتق‌گیری از انتگرال وردشی

$$I(\alpha) = -\varepsilon_1[2\alpha^2 - 8\alpha + \tfrac{5}{4}\alpha] = -\varepsilon_1[2\alpha^2 - \tfrac{27}{4}\alpha]$$

نتیجه خواهیم گرفت

$$\left.\frac{dI}{d\alpha}\right|_{\alpha=\alpha_0} = -\varepsilon_1(4\alpha_0 - \tfrac{27}{4}) = 0 \qquad \text{یا} \qquad \alpha_0 = \tfrac{27}{16}$$

انرژی و ویژه تابع وردشی برای حالت پایه هلیوم می‌شود

$$E_{\text{var}} = I(\alpha_0) = -\varepsilon_1[2(\tfrac{27}{16})^2 - \tfrac{27}{4}\,\tfrac{27}{16}] = 2(\tfrac{27}{16})^2\varepsilon_1 \sim -76.6 \quad eV$$

و

$$\Psi_{\text{var}} = \left[\frac{(\frac{27}{16})^3}{\pi a^3}\right] \exp\left[-(\tfrac{27}{16})\,\frac{(r^{(1)} + r^{(2)})}{a}\right] \qquad (۱۵-۱۰)$$

این انرژی از نتیجه مرتبه صفر پریشیدگی ($E_{\text{pert}} \simeq -74$ eV) کمتراست و بنابراین دقیقتر است . مقدار مشاهده شده برای انرژی حالت پایه عبارت است از

$$E_{\text{exp}} \simeq -78.6 \quad \text{eV}$$

می‌توان با تعمیم تابع آزمایشی به‌طوری که پارامترهای زیادتری در برداشته باشد نتایج فوق را بهبود بخشید . هیلراس یک تابع آزمایشی به‌شکل

$$\Psi_{\text{trial}} = e^{-as}P(s, t, u)$$

به‌کاربرد که در آن P یک چهارده جمله‌ای (با چهارده پارامتر) از متغیرهای زیر است

$$s = \frac{r^{(1)} + r^{(2)}}{a}, \qquad t = \frac{r^{(1)} - r^{(2)}}{a}, \qquad \text{و} \qquad u = \frac{|\mathbf{r}^{(1)} - \mathbf{r}^{(2)}|}{a}$$

انرژی وردشی به‌دست آمده برای حالت پایه، 0.0016 eV پائین‌تر از مقدار مشاهده شده است ــ یک تناقض ظاهری با قضیه وردشی. با جلوگیری از هرگونه خطای عددی، تفاوت مزبور باید به‌نادیده‌گرفتن جمله‌های ساختار ریز در هامیلتونی الکتروستاتیکی هلیوم نسبت داده شود. مرتبه این تفاوت به‌راستی از همان مرتبه ساختار ریز است.

می‌توان قضیه وردشی را به‌حالتهای برانگیخته هلیوم نیز اعمال کرد. این‌امر ایجاب می‌کند که شرایط اضافه‌تری (به‌عنوان مثال، تعامد نسبت به‌تابع حالت پایه) روی‌توابع‌حالت برانگیخته هلیوم اعمال کنیم و این کار خارج از محدودهٔ این کتاب است*.

۵ ــ مدل آماری توماس و فرمی برای اتمهای پیچیده

اتم Z الکترونی، چون یک سیستم چندجسمی است، نمی‌تواند دقیقا" حل شود. می‌توانستیم یک روش پریشیدگی را با استفاده از حالتهای اتمی اتم ایده‌آل به‌عنوان تقریب مرتبه صفر، اعمال کنیم. اما همان‌طور که اخیرا" دیدیم، تصحیحات وابسته به جمله‌های برهم‌کنش الکترونی غالبا" آنقدر بزرگ‌اندکه نظریهٔ پریشیدگی نمی‌تواند مفید باشد. خواهیم دید که هر الکترون اتمی را می‌توان طوری در نظر گرفت که، تقریبا"، به‌طور مستقل در یک پتانسیل الکتروستاتیکی حاصل از میدان کولنی هسته که به‌وسیله سایر الکترونها پوشش شده است حرکت کند. بنابراین داشتن مدلی که پتانسیل و چگالی بار در داخل ابر الکترونی یک اتم را تعیین کند مفید خواهد بود. چنین مدلی نخستین‌بار توسط توماس و توسط فرمی (۱۹۲۸) به‌طور مستقل ارائه شد.

مدل (آماری) توماس ــ فرمی فرض می‌کند که هسته به‌وسیله یک گاز الکترونی با تقارن کروی احاطه شده است. چگالی به‌حد کافی بزرگ است، به‌گونه‌ای که ابر الکترونی می‌تواند به‌عنوان یک گاز فرمی تبهگن در نظر گرفته شود. به‌علاوه، فرض شده است که چگالی تابعی

---

* برای بررسی مفصل اتم هلیوم به‌کتاب زیر مراجعه کنید

H.A. Bethe and E.E.Salpeter, " Quantum Mechanics of — one and Two Electron Atomes", PP.118-165. Springer -Verlag, Berlin, 1957.

از فاصله تا هسته است که به‌کندی با آن تغییر می‌کند* در نتیجه، هر عنصر حجم dr را می‌توان به‌عنوان جعبه‌ای که حاوی یک گاز الکترونی یکنواخت با چگالی موضعی $\rho(r)$ است در نظر گرفت. انرژی کل یک الکترون در داخل این جعبه عبارت است از

$$\varepsilon(r) = \frac{p^2}{2m} - e\phi(r) \qquad (۱۶-۱۰)$$

که در آن $\phi(r)$ پتانسیل موضعی در داخل عنصر حجم دیفرانسیلی است. انرژی جنبشی موضعی بیشینه، تراز فرمی موضعی، $\varepsilon_F(r) = p_F{}^2/2m$، نامیده می‌شود. با استفاده از رابطه‌بین چگالی موضعی و ε_F، (۹-۷۱)، خواهیم داشت

$$\varepsilon_{\max}(r) = \mu = \varepsilon_F - e\phi(r) = \frac{\hbar^2}{2m}[3\pi^2\rho(r)]^{2/3} - e\phi(r) \qquad (۱۷-۱۰)$$

انرژی موضعی کل بیشینه درست همان پتانسیل شیمیائی گاز است و وقتی تعادل حاصل شده باشد در همه‌جا ثابت است. برای یک اتم خنثی، می‌توان مقدار $\phi(r)$ و $\rho(r)$ در بینهایت را برابر با صفر در نظر گرفت، در این صورت نتیجه می‌شود که μ در آن نقطه صفر است. چون μ ثابت است، بنابر این باید در همه جا صفر باشد و از (۱۰-۱۷) نتیجه خواهد شد

$$\phi(r) = \frac{\hbar^2}{2me}[3\pi^2\rho(r)]^{2/3} \qquad (۱۸-۱۰)$$

این معادله ارتباطی بین چگالی موضعی و پتانسیل برقرار می‌سازد. از ترکیب این معادله و معادله پواسن، $\nabla^2\phi = 4\pi e\rho$، خواهیم داشت

$$\nabla^2\phi = \frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d\phi}{dr}\right) = \frac{4\pi e}{3\pi^2}\frac{(2me)^{3/2}}{\hbar^3}\phi^{3/2} \qquad (۱۹-۱۰)$$

وقتی $r \to 0$، قانون‌گاوس ایجاب می‌کند که میدان الکتریکی تماما" از هسته ناشی شده باشد

---

* بخصوص چگالی باید در فاصله‌ای که در حدود طول موجهای دوبروی الکترونها در آن ناحیه است، تقریبا" ثابت باشد. در اتمها، این شرط عموما" هم در فاصله بسیارنزدیک و هم در فاصله بسیار دوراز هسته نقض می‌شود، بنابراین مدل توماس ــ فرمی در این نواحی غیرقابل اعتماد است.

یعنی ،

$$\lim_{r\to 0} E \to \frac{Ze}{r^2} \qquad (۱۰ - ۲۰ \text{ الف})$$

به‌طور معادل ، وقتی به‌هسته نزدیک شویم پتانسیل باید به‌شکل $\lim_{r\to 0}\phi(r) \sim Ze/r$ در آید . شرط مرزی روی ϕ به‌طور مناسب به‌صورت $\lim_{r\to 0} r\phi = Ze$ نوشته می‌شود .

دوراز اتم (خنثی) ، انتظار داریم که پتانسیل (پوشش داده شده) سریع‌تراز $1/r$ سقوط کند زیرا بار کل اتم صفر است . بنابراین شرط مرزی دیگر برای ϕ عبارت است از

$$\lim_{r\to\infty} r\phi \to 0 \qquad (۱۰ - ۲۰ \text{ ب})$$

برای اینکه تحلیل ما مستقل از Z ، و بنابراین برای تمام اتمها معتبر باشد تبدیل مقیاسی

$$r = \frac{1}{2}\left(\frac{3\pi}{4}\right)^{2/3} \frac{\hbar^2}{me^2}\frac{x}{Z^{1/3}} = 0.885\, a\, \frac{x}{Z^{1/3}} \qquad (۱۰ - ۲۱)$$

را وارد می‌کنیم که درآن x متغیر (بدون بعد) توماس ــ فرمی‌است .به‌علاوه ،تابع توماس ــ فرمی χ را توسط

$$\phi = \frac{Ze\chi}{r} \qquad (۱۰ - ۲۲)$$

تعریف می‌کنیم . با استفاده از متغیرهای جدید ، (۱۰ــ۱۹) می‌شود

$$x^{1/2}\frac{d^2\chi}{dx^2} = \chi^{3/2} \qquad (۱۰ - ۲۳)$$

با شرایط مرزی

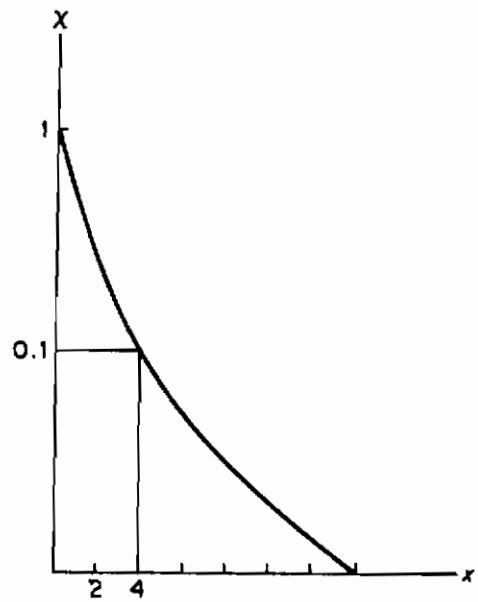
$$\lim_{x\to 0}\chi \to 1 \qquad \text{و} \qquad \lim_{x\to\infty}\chi \to 0$$

معادله (۱۰ــ۲۳) معادله (غیرخطی) توماس ــ فرمی است . جواب آن به‌طور عددی به‌دست می‌آید و به‌صورت منحنی نشان داده شده در شکل (۱۰ ــ ۵) است . وقتی χ تعیین شد، $\phi(r)$ و $\rho(r)$ را از (۱۰ــ۲۲) و (۱۰ــ۱۸) به‌دست می‌آوریم . هم پتانسیل و هم چگالی هردو بسته به‌مقدار Z از اتمی به‌اتم دیگر تغییر می‌کنند .

با وجودی که مدل توماس ــ فرمی از نظر ماهیت نیمه‌کلاسیکی است و اطلاعات کمی از جزئیات ساختاراتمی به‌دست می‌دهد ،به‌بعضی‌از نتایجی منجر می‌شود که حتی دریک بررسی

بغرنج‌تر معتبر است . x_f را شعاع کره‌ای (در واحدهای توماس ــ فرمی) حول هسته تعریف خواهیم کرد که شامل کسر f از Z الکترون باشد . چون x_f مستقل از Z است ، نتیجه می‌شود که کسر داخل کره‌ای به‌شعاع r_f روی مقیاس واقعی فاصله ، با استفاده از (۱۰ــ۱۲) ، عبارت است از

$$r_f = \frac{0.885a}{Z^{1/3}} x_f$$



شکل (۱۰ــ۵) تابع توماس ــ فرمی $\chi(x)$. به‌منظور بزرگ نشان‌دادن منحنی برای مقادیر بزرگ x ، مقیاس قائم خطی نیست . توجه کنیم که $\chi(4)$ فقط یک دهم $\chi(0)=1$ است .

اگر "اندازه" اتم را عبارت از فاصله شعاعی که در آن کسر معینی (مثلاً ۹۰٪) الکترونها قرار دارند در نظر بگیریم ، این اندازه با افزایش عدد اتمی به‌صورت $Z^{-1/3}$ کاهش می‌یابد . این "انقباض" اتم با افزایش Z یک ویژگی برای اتمها است و حتی در دقیق‌ترین بررسیها ظاهر می‌شود .

مفاهیم آشنای ظرفیت و ساختار لایه‌ای از مدل آماری توماس ــ فرمی نتیجه نمی‌شوند . یک بررسی کوانتومی دقیق‌تر از اتم Z الکترونی نخست توسط هارتری و توسط فوک ارائه‌شد . تقریب هارتری ــ فوک نتایجی را به‌دست می‌دهد که برای درک ما از اتم اساسی هستند و زیربنائی برای شیمی مولکولی تشکیل می‌دهند .

۶ـ روش میدان خود سازگار و تقریب هارتری ـ فوک ـ اسلاتر

اتم Z الکترونی ـ یک سیستم چند جسمی برهم‌کنش کننده ـ نمی‌تواند دقیقاً" بررسی شود . طبیعی به‌نظر می‌رسد که در تقریب مرتبه صفر برهم‌کنش‌ها را نادیده بگیریم و نظریه پریشیدگی را اعمال کنیم . اما ، چون انرژی برهم‌کنش الکترونها قابل ملاحظه است ، بعید است‌که حالتهای اتمی ایده‌آل که از توابع مداری هیدرژن‌مانند تشکیل شده باشند بتوانند حتی شباهتی جزئی با ویژه‌حالتهای اتمهای حقیقی داشته باشند .

یک راه برای به‌دست‌آوردن توابع مداری دقیق‌تر این است که فرض کنیم هسته از نظر الکتروستاتیکی به‌وسیله یک پتانسیل موثر متوسط حاصل از ابر الکترونی پوشش شده است . به‌طورمعادل ، برهم‌کنشهای دوجسمی به‌وسیله پتانسیلهای یک جسمی‌مؤثر جایگزین‌می‌شوند. هامیلتونی دقیق برای اتم می‌تواند با اضافه‌کردن‌و کم‌کردن پتانسیل موثر $V_{eff}^{(q)}(\mathbf{r}^{(q)})$ بازنویسی شود ، یعنی ،

$$\mathscr{H} = \left\{\sum_{q=1}^{Z} -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^{(q)2} - \frac{Ze^2}{r^{(q)}} + V_{eff}^{(q)}(\mathbf{r}^{(q)})\right\}$$
$$+ \left\{\frac{1}{2}\sum_{q}^{Z}\sum_{t\neq q}^{Z}\frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(q)} - \mathbf{r}^{(t)}|} - \sum_{q}^{Z} V_{eff}^{(q)}(\mathbf{r}^{(q)})\right\} \qquad (۲۴-۱۰)$$

آکولاد اول که به‌ترتیب شامل انرژی جنبشی ، پتانسیل الکتروستاتیکی هسته و پتانسیل موثر پوششی می‌باشد به‌عنوان هامیلتونی ناپریشیده درنظر گرفته می‌شود . آکولاد دوم ، *انرژی همبستگی* ، معرف تفاضل بین برهم‌کنشهای دوجسمی و پتانسیلهای یک جسمی مؤثر است و به‌عنوان پریشیدگی منظورخواهد شد ؛این‌جمله مسئول *همبستگی‌های دینامیکی* بین‌الکترونها است . منظور ، البته ، پیداکردن پتانسیل‌های موثری است که به‌بهترین وجه نزدیک به‌برهم کنشهای دوجسمی باشند زیرا در این صورت جمله همبستگی به‌اندازه‌ای کوچک خواهد بود که بتوانیم نظریه پریشیدگی را اعمال کنیم .

چون هامیلتونی ناپریشیده حاصل جمع عملگرهای یک جسمی است ، معادله شرودینگر متناظر چندجسمی تفکیک‌پذیر است و منجر به‌مجموعه‌ای از معادلات ویژه مقداری یک جسمی به‌شکل

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{Ze^2}{r} + V_{eff}(\mathbf{r})\right\}\psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i\psi_i(\mathbf{r}) \qquad (۲۵-۱۰)$$

می‌شود. ψ_i و ε_i عبارتنداز ویژه تابعها و انرژیهای مدارها. برای سهولت، فرض کرده‌ایم که پتانسیل موثر وارد به‌تمام الکترونها یکی است و اینکه این پتانسیل مرکزی است. یک تفاوت مهم بین این حالتهای مداری وحالتهای هیدرژن‌مانند اتم ایده‌ال این‌است‌که‌تبهگنی تصادفی (کولنی) در حالتهای مداری وجود ندارد. در نتیجه، انرژیهای مداری هم به n و هم به l بستگی‌دارند. *انرژی کل اتم عبارت است از حاصل‌جمع انرژیهای حالتهای‌اشغال شده**.

حالتهای اتمی می‌توانند از دترمینانهای اسلاتر مدارهای اشغال شده تشکیل شوند. چگالی بار ابر الکترونی در یک آرایش داده شده به‌وسیله رابطه

$$e\rho(\mathbf{r}) = e\sum_{i=1}^{Z} |\psi_i|^2 \qquad (۲۶-۱۰)$$

به‌چگالیهای احتمال ذره انفردای مرتبط می‌شود، که در آن جمع‌بندی روی مدارهای اشغال شده انجام شده است.

موجه به‌نظرمی‌رسدکه پتانسیل موثر پوششی به‌طریقی به‌این چگالی بستگی داشته‌باشد و بنابراین به‌وسیله ماهیت ویژه تابعهای مداری اشغال شده تعیین شود. به‌یک معنا، وقتی می‌گوئیم ψ_i توسط (۱۰–۲۵) به $V_{\text{eff}}(\mathbf{r})$ بستگی دارد و $V_{\text{eff}}(\mathbf{r})$ به‌نوبه‌خود ازطریق (۱۰–۲۶) به ψ_i بستگی دارد، وارد مدار بسته‌ای خواهیم شد. این، در واقع، همان فکری است که در ورای روش میدان خودسازگار (SCF) که برای تعیین V_{eff} در یک آرایش داده شده به‌کار رفت، قرار دارد. نحوه عمل برای آرایش‌های حالت پایه را به‌طور خلاصه شرح می‌دهیم.

(الف) یک پتانسیل موثرحالت پایه تخمین می‌زنیم (به‌عنوان مثال، پتانسیل توماس–فرمی را برای آزمایش انتخاب می‌کنیم)

(ب) معادله (۱۰–۲۵) را حل می‌کنیم و توابع مداری ψ_i و ویژه مقدارهای ε_i را که Z تابع مداری با انرژی کمینه را نمایش می‌دهند، پیدا می‌کنیم.

(ج) از (۱۰–۲۶) چگالی ابر الکترونی را با استفاده از Z تابع مداری در (ب) پیدا

---

* مانند نظریه هارتری–فوک، استثناهایی برای این قاعدهٔ انرژی کل وجود دارد، اما در اینجا مورد بحث قرار نخواهند گرفت. به‌عنوان مثال به‌کتاب زیر مراجعه کنید:

H.A. Bethe and R.W.Jackiw, " Intermediate Quantum Mechanics," 2nd ed., P.63. Benjamin, New York, 1968.

می‌کنیم .

(د) یک رابطه بین چگالی ابر و پتانسیل موثر وضع می‌کنیم (مثلا" قانون کولن) و $V_{\text{eff}}(\mathbf{r})$ را محاسبه می‌کنیم .

(هـ) اگر $V_{\text{eff}}(\mathbf{r})$ مرکزی نباشد ، یک‌متوسط گیری روی یک زاویه‌حجمی‌انجام می‌دهیم و $V_{\text{eff}}(r)$ را به‌دست می‌آوریم .

(و) به‌مرحله (ب) باز می‌گردیم و مراحل از (ب) تا (و) را آنقدر تکرار می‌کنیم تا خود سازگاری حاصل گردد ، یعنی ، تا دیگر V_{eff} در هردوره‌ای تغییر نکند .

تعداد دوره‌های لازم برای رسیدن به‌یک حالت معقول از خودسازگاری بستگی به‌تخمین اولیه در مرحله (الف) دارد . بعلاوه ، پتانسیل موثر به‌دست آمده به‌طور مؤثری بستگی به مرحله (د) دارد .

هارتری در ابتدا پیشنهاد کرد که پتانسیل باید توسط قانون کولن به‌چگالی بار ربط داده شود*، یعنی ،

$$V_{\text{eff}}(\mathbf{r}) = e^2 \int \frac{d\mathbf{r}'\, \rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \qquad (۲۷ - ۱۰)$$

در این تحلیل ، هارتری کاملا" اثر همبستگی آماری در (۱۰-۲۷) را نادیده گرفت . فوک ، با به‌کاربردن روش وردشی ، نظریه هارتری را تعمیم داد تا آثار تبادلی را نیز شامل شود . متاسفانه ، روش فوک منجر به‌مجموعه معادلاتی می‌شود که بررسی عددی آنها نسبتا" مشکل است . اسلاتر معادلات هارتری - فوک را با استفاده از یک تقریب اضافی مبتنی بر نظریه توماس - فرمی ساده کرد . نتیجه اسلاتر در زیر خلاصه می‌شود :

$$V_{\text{eff}}(\mathbf{r}) = e^2 \int \frac{d\mathbf{r}'\, \rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} - \frac{3}{2} e^2 \left(\frac{3}{\pi} \rho(\mathbf{r})\right)^{1/3} \qquad (۲۸ - ۱۰)$$

که در آن

$$\rho = \sum_{\substack{\text{occupied} \\ \text{orbitals}}} |\psi_i|^2$$

در حالی که جمله اول اساسا" پتانسیل هارتری است ، جمله دوم معرف تقریب اسلاتر از

---

* در نظریه‌هارتری انتگرال‌کولنی (۱۰-۲۷) با حذف اثرالکترون روی خودش محاسبه‌می‌شود . در (۱۰-۲۸) انرژی خودی گنجانده شده است .

تصحیحات تبادلی فوک است .

تقریب اسلاتر در فاصله‌های زیاد از هسته اعتبار خود را از دست می‌دهد . چون انتگرال کولنی در (۱۰–۲۸) مربوط به‌چشمه‌ای است که بار آن $-Ze$ است، ازقانون‌گاوس‌نتیجه می‌شودکه این پتانسیل در r بزرگ پتانسیل هسته را خنثی می‌کند . به‌طور معادل ، پتانسیل کل از دید یک الکترون لایه خارجی اساسا" پتانسیل تبادلی اسلاتر است که با فاصله به‌طور نمائی‌سقوط می‌کند .این مطلب‌از نظرفیزیکی نادرست است زیرا انتظار داریم که یک‌الکترون خارجی یک پتانسیل پوشش شده معادل با پتانسیل الکترون هیدرژنی، یعنی $-e^2/r$ را به‌بینید. تصحیح اسلاترباید در فاصله زیاد با جانشینی جمله $\rho^{1/3}$ به‌وسیله یک "دنباله کولنی"(یعنی $-e^2/r$)، اصلاح گردد (شکل ۱۰–۶) .

چون پتانسیل HFS معمولا" تقارن کروی ندارد ، مناسب است که از آن روی یک‌زاویه حجمی متوسط‌گرفت ، یعنی ،

$$V_{HFS}(r) = \frac{1}{4\pi}\int_{4\pi} V_{HFS}(r)\, d\Omega \qquad (۱۰ - ۲۹)$$

این فرایند متوسط‌گیری تقریب میدان مرکزی نامیده می‌شود که در بالا در مرحله (هـ) ذکر گردیده است .

کامپیوترها محاسبات پتانسیل HFS خودسازگاررا آسان‌کرده‌اند .پتانسیلهای حالت‌پایه برای همه اتمهای جدول تناوبی محاسبه شده و در جداولی آورده شده‌اند*

نظریه HFS به‌صورتی که در فوق ارائه شد باید در مورد الکترونهای داخلی اتمهای سنگین اصلاح شود . چون این الکترونها انرژیهائی در حدود $50\ keV\sim$ دارند آثار نسبیتی قابل‌ملاحظه‌اند .

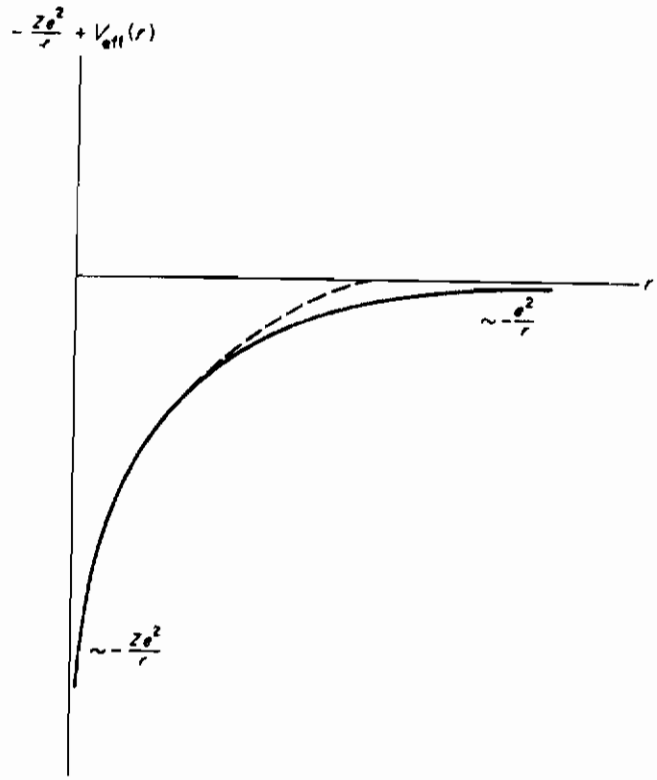
معمولا" فرض می‌شود که پتانسیل موثر حالت پایه شبیه به‌پتانسیل حالتهای برانگیخته پائینی است ، یعنی ، حالتهائی که در آنها فقط یک الکترون خارجی برانگیخته شده است . توجیه این فرض این است که چگالی اتمی یک اتم با Z بزرگ ، وقتی که فقط یک الکترون به‌مدار مجاور برود ، تغییر قابل‌ملاحظه‌ای نمی‌کند . توابع مداری HFS دارای شکل

$$\psi_{nlm_lm_s} = R_{nl}(r)\, Y_{lm_l}(\theta, \phi)\, |m_s\rangle$$

---

* به‌کتاب زیر مراجعه کنید :

F.Herman and S. skillman, " Atomic structure Calculations, Prentice-Hall. Englewood Cliffs, New Jersey, 1963.



شکل (۱۰-۶) یک تابع انرژی پتانسیل نمونه‌ای که الکترون اتمی در آن قرار دارد . تابع رسم‌شده از یک پتانسیل HFS اصلاح شده به‌دست آمده است. به دنباله کولنی متصل شده در $r \to \infty$ توجه کنید . در نزدیکی هسته ، پتانسیل عمدتا" محصول بار هسته است . منحنی خط چین پتانسیل HFS اصلاح‌نشده را نشان می‌دهد .

می‌باشند . این توابع شبیه به‌توابع هیدرژن مانند اتم ایده‌آل هستند به‌استثنای اینکه‌قسمت شعاعی دیگر یک تابع وابسته لاگر نیست . انرژی مداری هم به l و هم به n بستگی دارد و بنابراین دیگر "بوهرگونه" نیست .

حالتهای اتمی به‌دست‌آمده از مدارهای HFS نمایانگر تقریبهای مرتبه صفراند . از نظر انرژی ، این حالتها برحالتهای اتم حقیقی منطبق‌اند . به‌طور معادل ، انرژی همبستگی در (۱۰-۲۴) کاملا" کوچک است . این تعجب‌آور نیست زیرا نظریه فوک بر یک اصل وردشی پایه‌گذاری شده و انرژیهای دقیق غیرمنتظره نیستند . از طرف دیگر ، خود تابع حالتهای HFS ممکن است از سایر لحاظ شبیه تابع حالتهای یک اتم حقیقی نباشند . توابع وردشی عموما" همبستگی کمی با حالتهای دقیق دارند . تا آنجا که به‌انرژی مربوط است ، شیمیایی یا طیف‌نمائی ، تقریب HFS می‌تواند کاملا" درست باشد . برای مشاهده‌پذیرهای دیگر ، این

تقریب می‌تواند به‌نتایج کاملا" بی‌معنی‌ای منجر شود .

۷ــ خواص اتمها در تقریب HFS

هامیلتونی الکتروستاتیکی برای اتم Z الکترونی در حالت پایه‌اش می‌تواند به‌صورت

$$\mathscr{H} = \mathscr{H}_0 + \lambda V$$

بیان شود که در آن

$$\mathscr{H}_0 = \sum_{q=1}^{Z} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^{(q)2} - \frac{Ze}{r^{(q)}} + V_{\mathrm{HFS}}(r^{(q)}) \right\} \qquad (۳۰ - ۱۰)$$

عبارت است از هامیلتونی هارتری ــ فوک ــ اسلاتر و

$$\lambda V = \tfrac{1}{2} \sum_{q}^{Z} \sum_{t \neq q}^{Z} \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(q)} - \mathbf{r}^{(t)}|} - \sum_{q=1}^{Z} V_{\mathrm{HFS}}(r^{(q)}) \qquad (۳۱ - ۱۰)$$

عبارت است از جمله همبستگی (دینامیکی) .

حالتهای ایده‌آل ناپریشیده می‌توانند از دترمینانهای اسلاتر مدارهای HFS ، یعنی ، $\psi_{nlm_lm_s}$ ساخته شوند . برای یک آرایش n-l داده شده از این مدارها ، مدل‌برداری ایجاب می‌کند که حالتهای ایده‌آل بتوانند با کمک*

$$|E_\alpha LS\rangle = \sum_{\substack{m_s \\ m_s' \\ \vdots}} \sum_{\substack{m_l \\ m_l' \\ \vdots}} C_{\substack{mm_l'\cdots \\ m_sm_s'\cdots}} |nn' \cdots ll' \cdots m_l m_l' \cdots m_s m_s' \cdots\rangle \qquad (۳۲ - ۱۰)$$

با محدودیتهای

$$|\mathbf{l} + \mathbf{l}' + \cdots|_{\min} \leqslant L \leqslant (l + l' + \cdots)$$

$$|\mathbf{s} + \mathbf{s}' + \cdots|_{\min} \leqslant S \leqslant (s + s' + \cdots) \qquad (۳۳ - ۱۰)$$

---

* بقیه اعداد کوانتومی را ننوشته‌ایم زیرا بسته به‌طرحواره جفت‌شدگی می‌توانند M_L و M_S یا J و M_J باشند .

ساخته شوند . انرژی کل آرایش n–l عبارت است از

$$E_{\mathrm{HFS}} = \varepsilon_{nl} + \varepsilon_{n'l'} + \cdots . \qquad (۳۴-۱۰)$$

انرژی اتم به‌مقادیر n و l مربوط به‌مدارهای HFS اشغال شده بستگی دارد . گفته می‌شود که الکترونهای با یک عدد کوانتومی اصلی n در یک lایه قراردارند .برای یک n معین،الکترونهای با یک l در یک زیر lایه قرار دارند . اصل پاولی حداکثر $2(2l+1)$ الکترون را در یک زیرلایه و $2n^2$ الکترون را در یک لایه مجاز می‌دارد .درحالت پایه یک اتم ،مدارهای باکمترین انرژی اشغال هستند .برای n و l های به‌حدکافی بزرگ بستگی ε_{nl} به l ممکن‌است به‌بستگی آن به n غالب گردد . به‌عنوان مثال ، در $^{36}\mathrm{Kr}$ لایه 4s در انرژی پائین‌تری نسبت به لایه 3d قرار دارد و بنابراین قبل از آن پر می‌شود .

چگالی شعاعی یک اتم به‌وسیله ویژه تابعهای شعاعی مدارهای اشغال‌شده به‌صورت

$$\mathscr{P}_r = \sum_{\substack{nl \\ \text{occupied}}}^{Z} R_{nl}^2(r) r^2 \qquad (۳۵-۱۰)$$

تعیین می‌شود . چگالی شعاعی حالت پایه برای $^{18}\mathrm{Ar}(1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6)$ در شکل (۱۰–۷) رسم شده است . توجه کنیم که این چگالی در فاصله‌های مشخصه‌ای از هسته‌دارای قله‌هائی است که تجمع فضائی الکترونها را در داخل لایه‌ها نشان می‌دهند .

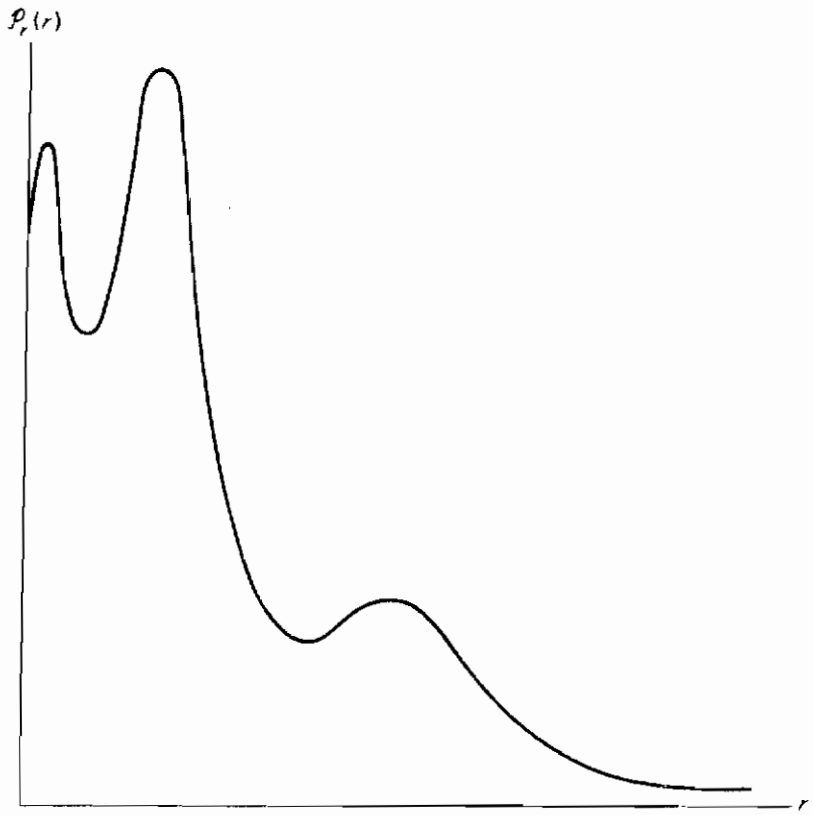
حالت پایه یک اتم با لایه‌های کاملا" پر شده نا تبهگن است زیرا فقط یک آرایش از اعدادکوانتومی مغناطیسی ، بدون نقض اصل پاولی ، امکان‌پذیر است . در واقع ،زیرحالتهای مغناطیسی‌مداری (m_l) به‌طور متقارن حول مقدارصفرمجتمع شده‌اند .هم‌چنین نیمی‌ازالکترونها دارای $m_s = \frac{1}{2}$ هستند در حالی که نیمی دیگر دارای $m_s = -\frac{1}{2}$ می‌باشند . حالت پایه یک چنین اتمی به‌طور خود به‌خود یک حالت $^1S_0$ $(L = 0,\ S = 0,\ J = 0)$ است . می‌توانیم‌این نتیجه را تا حدی با مشاهده اینکه یک زیر لایه پرسهمی در تکانه زاویه‌ای اتم‌ندارد ، تعمیم دهیم . در نتیجه ، کافی است مدل برداری فقط به‌الکترونهای یک زیر لایه پرنشده اعمال شود تا حالت طیف نمایی اتم تعیین شود .

اتمهایی که آخرین زیرلایه آنها p^6 و کاملا" پر باشد معمولا" انرژی فوق‌العاده زیادی برای برانگیخته‌شدن طلب می‌کنند . بنابراین ، به‌عنوان مثال ، اتمهای $^{10}\mathrm{Ne}$ ، $(1s^2, 2s^2, 2p^6)$، $^{18}\mathrm{Ar}$ $(1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6)$ و $^{36}\mathrm{Kr}$ $(1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 4s^2, 3d^{10}, 4p^6)$* همه گاز

---

* به "جابه‌جایی" زیر لایه‌های 4s و 3d توجه کنید .

بی‌اثراند *. بعلاوه، همه آنها دارای حالتهای پایه اتمی ^1S هستند. این اتمها از نظر شیمیائی غیرفعال می‌باشند و نسبتاً پایدارند و انرژیهای یونش آنها خیلی زیاد است.



شکل (۱۰-۷) چگالی شعاعی حالت پایه برای آرگون

اتمهائی که یک الکترون کمتر از الکترونهای گازهای بی‌اثر مذکور در فوق دارند، از نظر انرژی تمایل دارند که در یک واکنش شیمیایی یک الکترون کسب کنند. این اتمها، یعنی $^9F(\cdots 2p^5)$, $^{17}Cl(\cdots 3p^5)$, $^{35}Br(\cdots 4p^5)$ و $^{53}I(\cdots 5p^5)$, به هالوژنها موسومند. از لحاظ شیمیائی مثل غیرفلزهای فعال رفتار می‌کنند و انرژیهای زیاد واکنش را تولید می‌کنند.

اتمهائی که یک الکترون بیشتر از گازهای بی‌اثر دارند، از نظر انرژی تمایل دارند که این الکترون ظرفیت را در واکنشهای شیمیائی شرکت دهند و یک رفتار فلزگونه‌ای از خود بروز می‌دهند. این اتمهای قلیائی شامل $^{11}Na(\cdots 2p^6, 3s^1)$, $^{19}K(\cdots 3p^6, 4s^1)$, $^{37}Rb(\cdots 4p^6, 5s^1)$

---

* اتم ^2He با یک آرایش $1s^2$ نیز بی‌اثر است.

و $^{55}Cs(\cdots 5p^6, 6s^1)$ می‌باشند* . اتمهای قلیائی از اهمیت خاصی برخوردارند زیرا خطوط طیفی آنها کاملا" شبیه به‌خطوط طیفی هیدرژن است . چون دراتمهای قلیائی الکترونهای داخلی درزیر لایه‌های پرقراردارند ، تکانه‌زاویه‌ای مشخصه آنها به‌وسیله‌تنها الکترون ظرفیت s تعیین می‌شود . حالت پایه‌یک‌قلیائی‌مثل هیدرژن‌یک‌دوگانه $^2S_{\frac{1}{2}}$ ($L = 0$ ، $S = \frac{1}{2}$ ، $J = \frac{1}{2}$) است . اختلاف اصلی بین الکترون ظرفیت در یک قلیائی و الکترون هیدرژنی این است که اولی تحت یک پتانسیل پوشش شده غیر کولنی قرار دارد ، در نتیجه ، طیف انرژی قلیائی بوهرگونه نیست .

یک فرمول تجربی‌خیلی مفید برای انرژی الکترون‌ظرفیت در یک قلیائی عبارت‌است‌از

$$\varepsilon_{nl} = \frac{\varepsilon_1}{[n - \mu(l)]^2} \qquad (\varepsilon_1 = -13.6 \quad \text{eV}) \qquad (۳۶-۱۰)$$

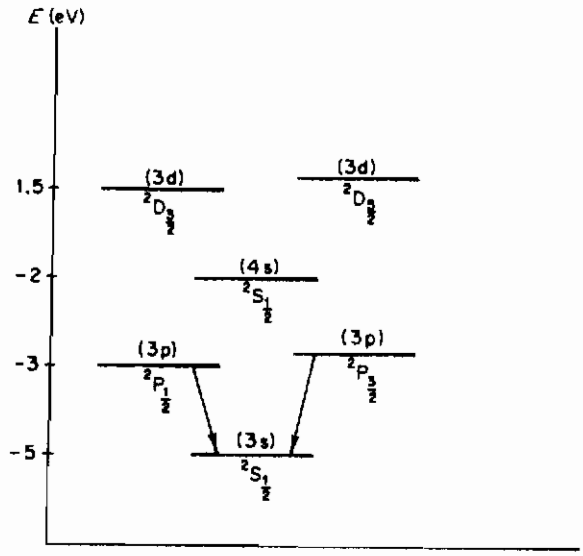
انحرافهای ازفرمول بوهربه‌وسیله‌مجموعه‌ای از پارامترهای $\mu(l)$ موسوم به‌نقایص‌کوانتومی مشخص‌می‌شوند . این پارامترها ازیک قلیایی به‌قلیایی دیگرتغییرکرده وپوشش هسته‌به‌وسیله الکترونهای داخلی (مغزه) را ایجاد می‌کنند . برای سدیم ($n \geqslant 3$) ، نقائص کوانتومی‌عبارتند از $\mu(0) = 1.35$ ، $\mu(1) = 0.86$ ، $\mu(2) = 0.01$ و $\mu(3) \simeq 0$. این پارامترها باافزایش l کاهش می‌یابند . برای l های بزرگ (مدارهای شبه دایره‌ای) ، الکترونها به‌طور قابل ملاحظه‌ای در مغزه نفوذ نمی‌کنند و یک پتانسیل کولنی پوششی معادل با پتانسیل الکترون هیدرژنی تحمل می‌کنند . برای مقادیر پائین ، مدار به‌شدت غیردایره‌ای می‌شود ، الکترون ظرفیت وارد مغزه شده و بیشتر هسته را می‌بیند . مدار به‌هسته مقیدتر و انرژی آن کمتراست . با استفاده از (۱۰-۳۶) و مقادیر $\mu(l)$ برای سدیم ، به‌سادگی می‌توان تحقیق کرد که تراز 4s دارای انرژی کمتری از تراز 3d است .

حالتهای اتمی پائین یک قلیائی با تراز اشغال شده به‌وسیله الکترون ظرفیت (نوری) تعیین می‌شود . حالت پایه $(3s^1)$ اتم Na ، به‌عنوان مثال ، یک حالت $^2S_{\frac{1}{2}}$ است . معادله (۱۰-۳۶) نشان می‌دهد که انرژی الکترون ظرفیت عبارت است از $\varepsilon_{30} \simeq -5.13$ eV . آرایش $3p^1$ می‌تواند به حالتهای $^3P_{\frac{1}{2}}$ و $^3P_{\frac{3}{2}}$ که هرکدام دارای $\varepsilon_{31} \simeq -2.96$ eV هستند پیوند شود . عملا" ، وقتی تصحیحات ساختار ریز در نظر گرفته شوند ، $^2P_{\frac{1}{2}}$ کمی بالای $^2P_{\frac{3}{2}}$ قرار خواهد گرفت . در واقع ، گذارهای از حالتهای $^2P_{\frac{1}{2}}$ و $^2P_{\frac{3}{2}}$ به‌حالت پایه

---

* $^3Li(1s^2, 2s^1)$ نیز یک قلیائی است زیرا یک الکترون بیش از $^2He(1s^2)$ دارد .

$^2S_{\frac{1}{2}}$ مسئول رنگ زرد مشخصه دوگانه "P" ($\lambda_1 = 5895.9$ Å) و ($\lambda_2 = 5889.9$ Å) در طیف گسیلی سدیم است (شکل ۱۰–۸) .



شکل (۱۰–۸) یک دیاگرام تراز برای حالتهای برانگیخته پائین الکترون ظرفیت سدیم که گذارهای مسئول دوگانهٔ زرد را نشان می‌دهد . جدائی مختصر در حالتهای دوگانه P و دوگانه D همان ساختار ریز است .

اتمهای با زیرلایه‌های نیمه‌پر به‌علت وجود تبهگنی از مرتبه بالا به‌طور قابل ملاحظه‌ای برای بررسی نظری مشکل‌ترند . به‌طور کلی ، برانگیختگی‌های نوری پائین در اتمها به‌وسیله گذارهای وابسته به‌الکترونهای خارجی ایجاد می‌شوند . الکترونهای داخلی نمی‌توانند گذارهایی به‌حالتهای مجاورانجام دهند زیرا این حالتها معمولا" اشغال هستند . با استفاده از الکترونهای پرانرژی یا فوتونها ممکن است یک اتم را از یک الکترون داخلی خالی کرد . گذارهای به‌حالتهای خالی‌معمولا" با گسیل تابش مشخصه اشعه X همراه هستند .

۸ ــ مولکولهای دواتمی ــ تقریب بی‌دررو

نظریه کوانتومی مولکولها به‌طور قابل ملاحظه‌ای پیچیده‌تر از نظریه کوانتومی اتمها است . در مولکولها ، الکترونها به‌بیش از یک مرکز نیرو ، که در اینجا هسته‌ها هستند ، مقیدند . پیچیدگی با توجه به‌این‌واقعیت که سیستم هسته‌ای در حرکت است افزایش بیشتری پیدا می‌کند . اما چند عامل فیزیکی وجود دارد که تقریبهایی را ممکن می‌سازند . فرکانس

حرکت هسته‌ای خیلی کمتراز فرکانس وابسته به‌الکترونها است* . این ویژگی کاربرد تقریب بی دررو را مجاز می‌نماید . ما این تقریب را وقتی به‌مولکولهای دو اتمی ، یعنی ،مولکولهائی که‌از دو اتم تشکیل شده‌اند ، اعمال می‌شود ، مورد بحث قرار خواهیم داد**.

معادله شرودینگربرای یک مولکول دو اتمی ، با صرفنظرکردن ازاسپین ،عبارت است از

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2}\left[\frac{\nabla^{(A)2}}{M_A}+\frac{\nabla^{(B)2}}{M_B}\right]+\sum_{j=1}^{Z_A+Z_B}-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^{(j)2}+V_{tot}(\mathbf{r}^{(j)},\mathbf{R}^{(A)},\mathbf{R}^{(B)})\right\}$$
$$\times\Psi_\alpha(\mathbf{r}^{(j)},\mathbf{R}^{(A)},\mathbf{R}^{(B)})$$
$$=\varepsilon_\alpha\Psi_\alpha(\mathbf{r}^{(j)},\mathbf{R}^{(A)},\mathbf{R}^{(B)}) \qquad (۳۷-۱۰)$$

که در آن M_A و M_B جرم هرکدام از هسته‌ها ، m جرم هر الکترون ،$\mathbf{R}^{(A)}$ و $\mathbf{R}^{(B)}$مکانهای‌هسته‌ها، $\mathbf{r}^{(j)}$ مکان الکترون j ام و Z_A ، Z_B عدد اتمی هرکدام از اتمها است .

انرژی پتانسیل کل سیستم مولکولی می‌تواند به‌صورت

$$V_{tot}=\frac{Z_A Z_B e^2}{|\mathbf{R}^{(A)}-\mathbf{R}^{(B)}|}+\frac{1}{2}\sum_i\sum_{j\neq i}\frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(i)}-\mathbf{r}^{(j)}|}$$
$$-e^2\sum_i\left\{\frac{Z_A}{|\mathbf{r}^{(i)}-\mathbf{R}^{(A)}|}+\frac{Z_B}{|\mathbf{r}^{(i)}-\mathbf{R}^{(B)}|}\right\} \qquad (۳۸-۱۰)$$

تجزیه‌شود . این جملات ، به‌ترتیب ، بیانگر انرژی دافعه الکتروستاتیکی بین هسته‌ها ،انرژی دافعه بین الکترونها ، و انرژی جاذبه بین الکترونها و هسته‌ها هستند .

چون انرژی جنبشی برای هسته‌ها خیلی کوچکتراز الکترونها است ، فرضهای زیر را در نظر می‌گیریم :

(الف) تابع حالت مولکولی می‌تواند به‌صورت یک حاصل ضرب از یک قسمت هسته‌ای در یک قسمت الکترونی بیان شود ، یعنی

$$\Psi_\alpha(\mathbf{r}^{(j)},\mathbf{R}^{(A)},\mathbf{R}^{(B)})=\xi_{nuc}(\mathbf{R}^{(A)},\mathbf{R}^{(B)})\psi_{elec}(\mathbf{r}^{(j)}) \qquad (۳۹-۱۰)$$

(ب) قسمت الکترونی می‌تواند طوری مورد بحث قرار گیرد که گوئی ، هسته‌ها با$\mathbf{R}^{(A)}$ و$\mathbf{R}^{(B)}$ ی ثابت ، ساکن باقی می‌مانند .

---

* این امر به‌خاطر این است که هسته‌ها به‌طور قابل ملاحظه‌ای از الکترونها سنگین‌ترند .

** تقریب بی‌دررو اولین‌بار توسط بورن و اپنهایمر به‌مولکولها اعمال شد (۱۹۲۷)

بعلاوه فرض خواهیم کرد که در مورد مولکول دواتمی، مختصات هسته‌ای، از طریق بردار نسبی $\mathbf{R} = \mathbf{R}^{(A)} - \mathbf{R}^{(B)}$ در پتانسیل مولکولی شرکت می‌کند. این استدلال‌نمی‌تواند به‌راحتی به‌یک مولکول سه‌اتمی، که دارای ساختار خیلی پیچیده‌تری است، تعمیم داده‌شود.

فرض(ب) ایجاب می‌کند که قسمت الکترونی در معادله

$$\left\{\sum_j -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^{(j)2} + V_{\text{tot}}(\mathbf{r}^{(j)}, \mathbf{R})\right\}\psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{r}^{(j)}, \mathbf{R}) = E_{\mathbf{n}}(\mathbf{R})\psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{r}^{(j)}, \mathbf{R}) \qquad (۴۰-۱۰)$$

صدق‌کند که در آن $\mathbf{n}$ معرف مجموعه‌ای از اعداد کوانتومی الکترونی است. باید تاکید شود که $\mathbf{R}$ در (۱۰-۴۰) یک متغیر نیست، بلکه صرفا" به‌عنوان یک پارامتر عمل می‌کند. به‌بیان دیگر، ویژه مقدارها و ویژه تابعهای الکترونی به‌طور پارامتری به‌جدائی هسته‌ای $\mathbf{R}$ بستگی دارند. برای خوب فهمیدن مفهوم (۱۰-۴۰)، فرض کنیم که هسته ساکن می‌ماند و $\mathbf{R}$ برابر با یک ثابت $\mathbf{R}_0$ است. بعلاوه فرض کنیم که الکترونها در حالت پایه هستند، $\mathbf{n} = 0$. اکنون فرض کنیم هسته به‌طور بی‌دررو حرکت کند، یعنی، $\mathbf{R}$ به‌آهستگی تغییر کند. در این‌صورت موجه به‌نظرمی‌رسد که الکترونها در حالت پایه($\mathbf{n}=0$)باقی بمانند، ولی تابع و انرژی‌حالت پایه به‌آهستگی تغییر کنند. به‌بیان دیگر، انرژی و ویژه تابع حالت پایه با حل (۱۰-۴۰)، با استفاده از مقدار لحظه‌ای $\mathbf{R}$، تعیین می‌شوند. به‌بیان معادل، وقتی مولکول ارتعاش می‌کند و می‌چرخد، ابر الکترونی تا برانگیخته باقی می‌ماند و به‌طور بی‌دررو حرکت هسته‌را تعقیب می‌کند. این توجیه شهودی برای تقریب بی‌دررو بر پایه قضیه بی‌دررو* که برای آن اثبات دقیقی وجود دارد، پایه‌گذاری شده است.

برای منظورما، کافی‌است موردی را در نظر بگیریم که در آن الکترونها در حالت پایه هستند. بنابراین، باید (۱۰-۴۰) را حل کنیم و تابع حالت پایه $\psi_0(\mathbf{r}^{(j)}, \mathbf{R})$ و انرژی $E_0(\mathbf{R})$ را برای تمام‌مقادیر پارامتری متغیر جدائی هسته‌ای $\mathbf{R}$ پیدا می‌کنیم. این‌کار فی‌نفسه یک محاسبه عددی پیچیده‌است. با بردن (۱۰-۳۹) در (۱۰-۳۷) و با استفاده‌از (۱۰-۴۰) به‌معادله هسته‌ای

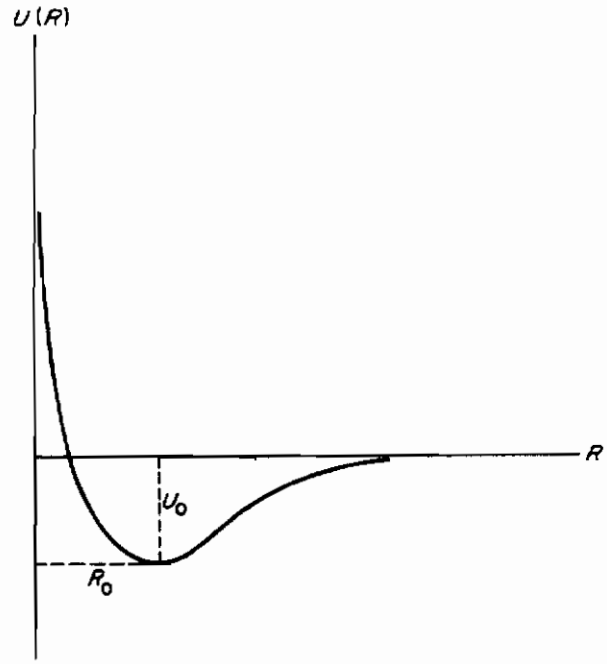
$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2}\left[\frac{\nabla^{(A)2}}{M_A} + \frac{\nabla^{(B)2}}{M_B}\right] + E_0(\mathbf{R})\right\}\xi_\nu(\mathbf{R}^{(A)}, \mathbf{R}^{(B)}) = \varepsilon_\nu\,\xi_\nu(\mathbf{R}^{(A)}, \mathbf{R}^{(B)}) \qquad (۴۱-۱۰)$$

---

* به‌کتاب زیر مراجعه کنید

A. Messiah, " Quantum Mechanics," Volume II,P.747. wiley, New York, 1962.

هدایت خواهیم شد . توجه کنیم که ویژه مقدارهای الکترونی نقش یک پتانسیل بین‌هسته‌ای (مولکولی)را بازی می‌کنند .به‌طورکلی ، قسمت هسته‌ای باید به‌صورت $\xi_{n,v}$ و انرژی به‌صورت $\varepsilon_{n,v}$ نوشته شوند زیرا پتانسیل مولکولی $E_n(\mathbf{R})$ به‌حالت الکترونی بستگی دارد .



شکل (۱۰ــ۹) پتانسیل مرس که نمایانگر انرژی مولکولی به‌صورت تابعی از فاصله بین هسته‌ای R است . انرژی کمینه U_0 در R_0 رخ می‌دهد و فاصله تعادل را تعیین می‌کند .

شکل عمومی $E_0(\mathbf{R})$ برای بیشتر مولکولهای دو اتمی می‌تواند به‌طور موجهی به‌پتانسیل مرس (شکل ۱۰ــ۹) تقریب زده شود

$$\begin{aligned} E_0(\mathbf{R}) = U(R) &= -U_0[1 - e^{-(R-R_0)/a}]^2 + U_0 \\ &= U_0\{1 - [1 - e^{-(R-R_0)/a}]^2\} \qquad (U_0 < 0) \end{aligned} \qquad (۴۲-۱۰)$$

پارامترهای U_0 و a بیانگر پارامترهای شدت و گستره‌اند و از مولکولی به‌مولکول دیگر تغییر می‌کنند . پارامتر R_0 فاصله‌ای است که در آن $U(R_0) = U_0$ کمینه است ، یعنی ، که در آن $U'(R_0) = 0$.بنابراین این پارامتر معرف جدائی تعادل هسته‌است .بعلاوه ، U_0 را می‌توان به‌عنوان انرژی تجزیه مولکول در نظر گرفت .

با اعمال تبدیل مرکز جرم به (۱۰ــ۴۰) ، معادله حرکت نسبی به‌شکل

$$\left\{-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2\mu_M}+U(R)\right\}\xi_\nu(\mathbf{R})=\varepsilon_\nu\,\xi_\nu(\mathbf{R}) \qquad (۴۳-۱۰)$$

در می‌آید که در آن

$$\mu_M=\frac{M_A+M_B}{M_A M_B} \quad \text{(جرم کاهش یافته هسته‌ها)}$$

چون پتانسیل مرس (۱۰–۴۲) دارای طبیعت مرکزی است ، (۱۰–۴۳) می‌تواند با به‌کاربردن

$$\xi_\nu(\mathbf{R})=u_{\nu,K}(R)\,Y_{K,M_K}(\theta,\phi) \qquad (K=0,1,2,\ldots;\quad |M_K|\leqslant K)$$

تفکیک شود که قسمت شعاعی آن در معادله

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu_M}\frac{d^2u_{\nu,K}}{dR^2}+\left(U(R)+\frac{\hbar^2}{2\mu_M}\frac{K(K+1)}{R^2}\right)u_{\nu,K}=\varepsilon_{\nu,K}\,u_{\nu,K} \qquad (۴۴-۱۰)$$

صدق می‌کند .

پتانسیل مولکولی موثر عبارت است از پتانسیل مرس و یک "پتانسیل گریز از مرکز" . درحالی‌که حل دقیق (۱۰–۴۴) نسبتاً پیچیده است ، این کار می‌تواند با فرض اینکه انحراف از وضع تعادل ، $\rho=R-R_0$ ، در مقایسه با R_0 کوچک است ، ساده شود . پتانسیل مرس (یا پتانسیل مولکولی دقیق اگر معلوم باشد) می‌تواند به‌یک سری تیلور در حول R_0 به‌صورت

$$U(R)=U_0+\tfrac{1}{2}U_0''\rho^2+\cdots \qquad (۴۵-۱۰)$$

بسط داده شود . در این بسط جمله خطی وجود ندارد زیرا ، بنا به تعریف R_0، داریم $U_0'=0$. مقدار مشتق دوم پتانسیل مرس در $R=R_0$ نقش ثابت کشسانی یک نیروی بازگرداننده خطی را بازی می‌کند . اگر ρ کوچک باشد ،یعنی ، مولکول خیلی برانگیخته نباشد ، دو جمله اول در (۱۰–۴۵) به‌پتانسیل مرس نزدیک می‌شوند .بعلاوه پتانسیل گریز از مرکز می‌تواند (تا مرتبه ρ^2) به‌صورت

$$\frac{\hbar^2}{2\mu_M}\frac{K(K+1)}{(R_0+\rho)^2}=\sigma K(K+1)\left[1-2\frac{\rho}{R_0}+3\frac{\rho^2}{{R_0}^2}+\cdots\right] \qquad (۴۶-۱۰)$$

بسط داده شود که در آن

$$\sigma=\frac{\hbar^2}{2\mu_M\,{R_0}^2}$$

تقریبا" معرف یک "کوانتوم " دوران است . کمیت $I_0 = \mu_M R_0^2$ به‌عنوان‌گشتاورا‌ینرسی‌مولکول نسبت به‌مرکز جرم وقتی مولکول در وضعیت تعادل است شناخته می‌شود .

فرض خواهیم کرد که انرژی دورانی $\sigma K(K+1)$ آن‌قدر کوچک است‌که جمله‌های شامل ρ و ρ^2 در (۱۰ــ۴۶) می‌توانند به‌عنوان پریشیدگی در نظر گرفته شوند . اگر در تقریب اول این جمله‌ها نادیده گرفته شوند ، ویژه مقدارهای انرژی در (۱۰ــ۴۴) به‌شکل

$$\varepsilon_{v,K} = U_0 + (v + \tfrac{1}{2})\hbar\omega + \sigma K(K+1) \qquad (۴۷ - ۱۰)$$

حاصل‌می‌شوند که در آن $\omega = (U_0''/\mu_M)^{1/2}$ و $v = 0, 1, 2, \ldots$. جمله اول انرژی حالت‌پایه الکترون درجدائی‌تعادل هسته‌ها است .جملات دوم وسوم به‌ترتیب بیانگر انرژیهای‌ارتعاشی و دورانی هستند .

وقتی تصحیحات (تا مرتبه ρ^2) پتانسیل گریزاز مرکز در (۱۰ــ۴۶) نگه داشته شوند ، نظریه کوانتومی انرژیهای ارتعاشی و دورانی را به‌صورت تقریبی زیر به‌دست می‌دهد

$$\varepsilon_{vib} \simeq (v + \tfrac{1}{2})\hbar\tilde{\omega}$$

$$\varepsilon_{rot} \simeq \sigma K(K+1) - \frac{\{K(K+1)\sigma\}^2}{3K(K+1)\sigma + \frac{1}{2}U_0'' R_0^2} \qquad (۴۸ - ۱۰)$$

فرکانس ارتعاشی اصلاح شده عبارت است از

$$\tilde{\omega} = \left\{\frac{U_0'' R_0^2 + 6K(K+1)\sigma}{\mu_M R_0^2}\right\}^{1/2} \qquad (۴۹ - ۱۰)$$

اصلاح فرکانس طبیعی و حضور پارامتر کشسانی U_0'' در انرژی دورانی از "کشیدگی‌مرکزگریزی" مولکول ناشی می‌شود . اگر مولکول نسبتا" سخت و مد دورانی پائین باشد $(\sigma K(K+1) \ll U_0'' R_0^2)$. مولکول مستقلا" شبیه به‌یک نوسانگر و یک چرخنده عمل می‌کند و (۱۰ــ۴۸) به (۱۰ــ۴۷) تبدیل می‌شود .

البته نتایج (۱۰ــ۴۸) فقط برای ترازهای خیلی پائین دورانی و ارتعاشی‌معتبراست*.

---

* این محدودیت مستقل از شرط‌لازم برای تقریب بی‌دررو است . برای بررسی برمبنای پریشیدگی به‌مرجع زیر رجوع کنید

Bethe and Jackiw, " Intermediate Quantum Mechanics", — 2nd ed, P. 131, Benjamin, 1968.

اگر تراز ارتعاشی خیلی بالا باشد ، انحراف از تعادل آنقدر بزرگ است که ایجاب می‌کند جملات بالاتراز ρ^2 را در بسط پتانسیل مرس در (۱۰–۴۵) نگه داریم . در واقع ، (۱۰–۴۸) به‌غلط ایجاب می‌کند که ترازهای ارتعاشی متساوی‌الفاصله باشند . برای انرژیهای به‌اندازه کافی بالا ، پتانسیل مرس حالتهای مولکولی نامقید (گسسته شده) را تایید می‌کند .این نکته پیشنهاد می‌کند که ، حداقل ، ترازهای مولکولی باید وقتی انرژی افزایش می‌یابد به‌طرف یک پیوستار سوق داده شوند . بررسی دقیق‌تری از مولکولها می‌تواند درجای دیگری پیدا شود*.

برای موردخاص مولکول دواتمی هم‌بسته (یعنی ،مرکب ازاتمهای مشابه) ، تمیزناپذیری دوهسته باید درنظر گرفته شود . این وضعیت را برای مولکول هیدرژن که هسته‌ها (پروتونها) فرمیونهای با اسپین $\frac{1}{2}$ هستند تشریح می‌کنیم . همانند مورد دو الکترون هلیوم ، اگر پروتونها اسپین‌های موازی داشته باشند ، برای اسپین کل هسته یک حالت سه‌گانه (با اسپین $S = 1$) داریم . بعلاوه ، تابع اسپینی کل هسته نسبت به‌تعویض مختصات اسپینی هسته‌ای متقارن است . چون تابع هسته‌ای کل برای فرمیونها باید کلا" پاد متقارن باشد ، نتیجه می‌شود که قسمت فضائی‌حالت سه‌گانه باید در اثر تعویض مختصات فضائی هسته‌ای تغییر علامت دهد . این تعویض از طریق یک انعکاس نسبت به‌مرکز جرم هسته‌ها خیلی راحت انجام می‌گیرد . برای اطمینان از پاد تقارن فضائی ، شرط می‌کنیم که قسمت فضائی تابع هسته‌ای باید دارای پاریته فرد باشد . چون عدد کوانتومی دورانی K پاریته حالت را تعیین می‌کند ، لازم است که K فرد باشد . بنابراین در حالت سه‌گانه دوپروتون (ارتو هیدرژن) فقط حالتهای دورانی فرد (یعنی ، $K = 1, 3, 5 \ldots$)امکان‌پذیر هستند . استدلال مشابهی نشان می‌دهدکه‌درحالت یگانه ($S = 0$) که اسپینهای پروتونها پاد موازی هستند (پارا هیدرژن) فقط حالتهای‌دورانی زوج ($K = 0, 2, 4 \ldots$) منجر به‌تابع حالتهایی برای سیستم پروتونی می‌شودکه کلا" پادمتقارن است . در نتیجه کوانتش دورانی (K زوج یا فرد) بستگی به‌حالت اسپین کل هسته‌ای دارد . احتمال اینکه دو پروتون جهتهای نسبی اسپینهای خود را عوض کنند کم‌است .به‌طور معادل اسپین کل هسته‌ای ، S ، در حین گذارها پایسته است و قاعده گزینش $\Delta S = 0$ را خواهیم داشت . معنی این مطلب این است که گذارها می‌توانند یا بین حالتهای پارا و پارا یا بین حالتهای ارتو و ارتو صورت‌گیرند و اینکه دو نمونهٔ گاز هیدرژنی از نظر طیف نمائی متمایز

---

* به‌کتاب زیر مراجعه کنید .

L. pauling and E.B. wilson, Jr. " Introdution to Quantum Mechanics", Chapters 12 and 13, Mc Graw-Hill,New York, 1935.

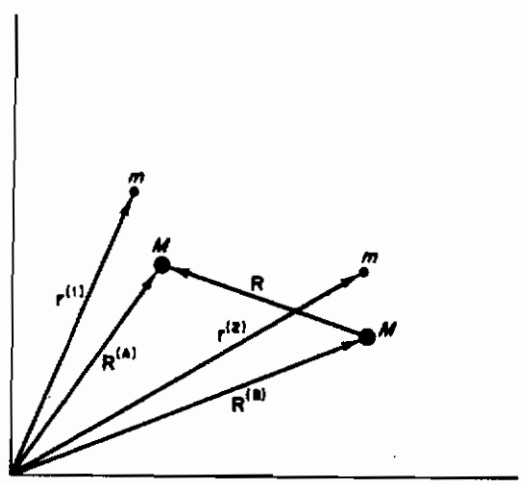
باقی می‌مانند .

۹ــ مولکول هیدرژن و پیوند کووالانت (نظریه لندن[۳] ــ هایتلر[۴])

مولکول هیدرژن دو الکترون دارد و شاید ساده‌ترین مولکول (خنثی) دو اتمی برای بررسی باشد . به‌کارگیری روشهای بخش قبل برای محاسبه شکل پتانسیل مولکولی $U(R)$ و پی بردن به‌اینکه یک پیوند کووالانت (هم قطبی) چگونه تشکیل می‌شود آموزنده است .

طبق (۱۰ــ۳۷) ، هامیلتونی مولکولی H_2 عبارت است از (شکل ۱۰ــ۱۰)

$$\begin{aligned}\mathscr{H} = &-\frac{\hbar^2}{2M}[\nabla^{(A)2}+\nabla^{(B)2}]-\frac{\hbar^2}{2m}[\nabla^{(1)2}+\nabla^{(2)2}]+\frac{e^2}{|\mathbf{R}^{(A)}-\mathbf{R}^{(B)}|}\\ &+\frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(1)}-\mathbf{r}^{(2)}|}-\frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(1)}-\mathbf{R}^{(A)}|}-\frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(2)}-\mathbf{R}^{(A)}|}\\ &-\frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(1)}-\mathbf{R}^{(B)}|}-\frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(2)}-\mathbf{R}^{(B)}|}\end{aligned} \qquad (۱۰-۵۰)$$



شکل (۱۰ــ۱۰) بردارهای مکانی وابسته به‌الکترونها (m) و پروتونها (M) در مولکول H_2

با استفاده از تقریب بی‌دررو ، و با ثابت نگه‌داشتن $\mathbf{R}^{(A)}$ و $\mathbf{R}^{(B)}$ و حذف $\nabla^{(A)}$ و $\nabla^{(B)}$ در (۱۰ــ۵۰) ، یک معادله ویژه مقداری برای الکترونها برقرار می‌کنیم . از (۱۰ــ۴۰) برای

---

۳ ــ London ۴ ــ Heitler

دو الکترون داریم

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}[\nabla^{(1)2}+\nabla^{(2)2}]+V_{\text{tot}}(\mathbf{R}^{(A)},\mathbf{R}^{(B)},\mathbf{r}^{(1)},\mathbf{r}^{(2)})\right\}\Psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{r}^{(1)},\mathbf{r}^{(2)},\mathbf{R}^{(A)},\mathbf{R}^{(B)})$$
$$=E_{\mathbf{n}}(R)\Psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{r}^{(1)},\mathbf{r}^{(2)},\mathbf{R}^{(A)},\mathbf{R}^{(B)}) \qquad (۵۱-۱۰)$$

که در آن $\mathbf{n}$ بیانگر اعداد کوانتومی حالت الکترونی است و $\mathbf{R}=\mathbf{R}^{(B)}-\mathbf{R}^{(A)}$. جمله V_{tot} شامل انرژی پتانسیل‌های داده شده در (۱۰–۵۰) است.

سعی خواهیم کرد که (۱۰–۵۱) را با استفاده از روشهای پریشیدگی فصل ۷ حل کنیم. فرض می‌کنیم که مولکول از دو اتم هیدرژن بدون برهم‌کنش که در آن الکترون ۱ روی هسته A و الکترون ۲ روی هسته B قراردارد تشکیل شده است. بنابراین هامیلتونی ناپریشیده عبارت است از

$$\mathscr{H}_0=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^{(1)2}-\frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(1)}-\mathbf{R}^{(A)}|}-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^{(2)2}-\frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(2)}-\mathbf{R}^{(B)}|} \qquad (۱۰-۵۲\text{ الف})$$

در صورتی که پریشیدگی نمایانگر برهم‌کنش بین دو اتم است، یعنی،

$$\lambda\mathscr{V}=\frac{e^2}{R}+\frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(1)}-\mathbf{r}^{(2)}|}-\frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(1)}-\mathbf{R}^{(B)}|}-\frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(2)}-\mathbf{R}^{(A)}|} \qquad (۱۰-۵۲\text{ ب})$$

هامیلتونی ناپریشیده منجر به‌یک معادله تفکیک‌پذیر می‌شود و ویژه تابعها نمایانگریک جفت اتم هیدرژن مجزا هستند؛ قسمت فضائی ویژه تابع می‌تواند به‌صورت یک حاصل‌ضرب به‌شکل

$$\Psi_{\mathbf{n}}=\psi^{(A)}_{nlm_l}(1)\psi^{(B)}_{n'l'm_{l'}}(2) \qquad (۱۰-۵۳)$$

نوشته شود که در آن توابع ψ توابع هیدرژنی هستند. اعداد کوانتومی حالتهای الکترونی دو اتم‌را مشخص می‌کنند. شاخصهای بالایی بیان می‌دارندکه دوویژه‌تابع نسبت‌به‌مبداءهای واقع بر روی هسته‌های متفاوت در نظر گرفته شده‌اند.

هامیلتونی کل در (۱۰–۵۱) نسبت به‌جایگشت الکترونها متقارن است. در نتیجه، وقتی مولکول تشکیل شد ذرات تمیزناپذیراند و لازم است که (۱۰–۵۳) را با نوشتن

$$\Psi_{\mathbf{n}}{}^{\pm}=\psi^{(A)}_{nlm_l}(1)\psi^{(B)}_{n'l'm_{l'}}(2)\pm\psi^{(A)}_{nlm_l}(2)\psi^{(B)}_{n'l'm_{l'}}(1) \qquad (۱۰-۵۴)$$

به‌طورمناسبی متقارن‌کنیم .مثل مورد اتم هلیوم ، قسمت فضائی و متقارن (علامت به‌اضافه) باید در یک قسمت اسپینی پاد متقارن متناظر یگانه $S = 0$ ، حالتی که در آن دو اسپین الکترونی مختلف‌الجهت هستند ، ضرب شود . همین‌طور قسمت پاد متقارن در (۱۰ــ۵۴)در یک قسمت اسپینی متقارن متناظر با سه‌گانهٔ $S = 1$ ،حالتی که در آن اسپینهای الکترونها به‌صورت موازی ترکیب می‌شوند ، ضرب می‌شود .

یک اشکال خیلی کوچک ، ناشی از این واقعیت که ما هامیلتونی موجود در (۱۰ــ۵۱)را که نسبت به‌جایگشت متقارن است قدری به‌طور نامتقارن مثل (۱۰ــ۵۲) تفکیک کرده‌ایم ، وجود دارد .توجه کنیم‌که نه (۱۰ــ۵۲ الف) و نه (۱۰ــ۵۲ ب) نسبت به‌شاخصهای الکترونها تقارن جایگشتی ندارند . بنابراین ، اصولاً (۱۰ــ۵۴) ویژه تابع $\mathscr{H}_0$ نیست . اما این اشکال می‌تواند با متقارن‌کردن معادلات پریشیدگی برطرف شود .

مناسب است که مبداء ترازها را طوری انتخاب کنیم که انرژی دو اتم بدون برهم‌کنش (سیستم ناپریشیده)صفر باشد .در این صورت پتانسیل مولکولی به‌طور ساده به‌وسیله‌تصحیح مرتبه اول ناشی از انرژی برهم‌کنش ، یعنی ،

$$E_n(R) = \frac{\lambda \int \mathscr{V} |\Psi_n{}^{\pm}|^2 \, d\mathbf{r}_1 \, d\mathbf{r}_2}{\int |\Psi_n{}^{\pm}|^2 \, d\mathbf{r}_1 \, d\mathbf{r}_2} \qquad (۱۰ - ۵۵)$$

داده می‌شود . مخرج این کسر توابع مولکولی را بهنجار می‌کند . وقتی جملات شامل $|\psi^{(A)}_{nlm_l}(1)\psi^{(B)}_{n'l'm_{l'}}(2)|^2$ را انتگرال‌گیری می‌کنیم ، از λV که توسط (۱۰ــ۵۲ ب) داده‌شده است برای متقارن‌کردن (۱۰ــ۵۵) استفاده می‌کنیم . از طرف دیگر وقتی جملات به شکل $|\psi^{(A)}_{nlm_l}(2)\psi^{(B)}_{n'l'm_{l'}}(1)|^2$ را انتگرال‌گیری می‌کنیم ، تبادل $1 \leftrightarrow 2$ را نیز در $\lambda \mathscr{V}$ انجام می‌دهیم . جملات ضربدری در $\lambda \mathscr{V}$ در اثر تبادل $1 \leftrightarrow 2$ دست نخورده باقی می‌مانند .

نشان‌دادن اینکه (۱۰ــ۵۵) شکل

$$E^{\pm}(R) = \frac{D \pm I}{1 \pm N} \qquad (۱۰ - ۵۶)$$

را به‌خود می‌گیرد که در آن

$$D(R) = \lambda \int V(\mathbf{R}^{(A)}, \mathbf{R}^{(B)}, \mathbf{r}^{(1)}, \mathbf{r}^{(2)}) \, |\psi^{(A)}_{nlm_l}(1)\psi^{(B)}_{n'l'm_{l'}}(2)|^2 \, d\mathbf{r}_1 \, d\mathbf{r}_2$$

$$I(R) = \lambda \int V(\mathbf{R}^{(A)}, \mathbf{R}^{(B)}, \mathbf{r}^{(1)}, \mathbf{r}^{(2)}) \{\mathrm{Re}\, \psi^{*(A)}_{nlm_l}(1)\psi^{*(B)}_{n'l'm_{l'}}(2) \times \psi^{(A)}_{nlm_l}(2)\psi^{(B)}_{n'l'm_{l'}}(1)\} \, d\mathbf{r}_1 \, d\mathbf{r}_2$$

$$N(R) = \mathrm{Re} \int \psi^{*(A)}_{nlm_l}(1)\psi^{*(B)}_{n'l'm_{l'}}(2)\psi^{(A)}_{nlm_l}(2)\psi^{(B)}_{n'l'm_{l'}}(1)\, d\mathbf{r}_1\, d\mathbf{r}_2$$

به‌عنوان تمرین به‌عهده خواننده واگذار می‌شود.

[illegible] $D(R)$ و $I(R)$ به‌ترتیب برهم‌کنشهای مستقیم و تبادلی بین دو اتم را نشان

غالبی بازی می‌کند . از (۱۰–۵۶) نتیجه می‌شود که برای R متوسط $E^+(R)$ منفی است در صورتی که $E^-(R)$ مثبت است (شکل ۱۰–۱۱) . بنابراین برای پیوندهای کووالانت به‌قواعد زیر می‌رسیم :

(۱) آثار تبادلی کوانتومی در تشکیل یک پیوند کووالانت یا هم‌قطبی پایدار نقش غالبی بازی می‌کنند .

(۲) دو اتم هیدرژن تنها درصورتی یک مولکول پایدار تشکیل می‌دهند که الکترونهای آنها پاد موازی باشند ، یعنی مولکول در حالت $S = 0$ ، یگانه ، تشکیل می‌شود .

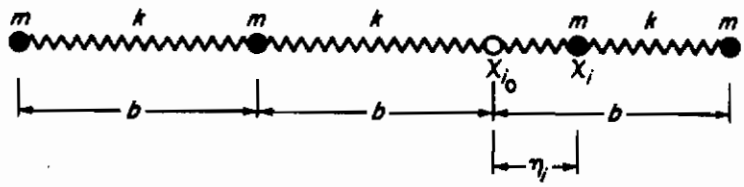
وقتی $E^+(R) = U(R)$ (به‌عنوان مثال در حالت پایه الکترونی) پیدا شد ، مشخصات ارتعاشی و دورانی مولکول H_2 می‌تواند مستقیما" با استفاده از روشهای بخش قبل به‌دست آیند .

۱۰– تبدیل به‌مختصات بهنجار ، شبکه خطی ، فونونها

زنجیرکشسان خطی یا شبکه خطی مثالی از یک مسئله چندجسمی حقیقی است که می‌تواند دقیقا" حل شود . این سیستم از یک ردیف یک بعدی N جرم نقطه‌ای یکسان که توسط فنرهای یکسانی به‌یکدیگر پیوند شده‌اند تشکیل شده است . برای سهولت ، فرض خواهیم کرد که فقط حرکتهای طولی ، یعنی حرکتهای در امتداد زنجیر ، امکان‌پذیر هستند . شبکه سه‌بعدی ، با اینکه قدری پیچیده‌تر از شبکه خطی است ، نیز می‌تواند حل شود و نقش مهمی در نظریه ارتعاشات شبکه‌ای جامدات بازی می‌کند . گرچه نیروهای بین اتمی کاملا" کشسان نیستند ، مادامی که تغییرمکان اتمها از وضعیت‌های تعادلشان کوچک است ، می‌توانند کشسان در نظر گرفته شوند .

هامیلتونی کلاسیکی زنجیر (شکل ۱۰–۱۲) عبارت است از

$$\mathscr{H} = \sum_{i=1}^{N} \frac{P_i^2}{2m} + \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{2} K(\eta_{i+1} - \eta_i)^2 \qquad (۱۰ - ۵۷)$$



شکل (۱۰–۱۲) یک زنجیر کشسان خطی که جرم i ام آن از وضع تعادلش تغییرمکان داده است .

که در آن $\eta_i = x_i - x_{i_0}$ معرف تغییر مکان جرم نقطه‌ای i ام ازوضع تعادل (درامتداد محور x) است و K ثابت کشسانی فنرها است . این K را با عدد کوانتومی دورانی بخش ۸ اشتباه نکنید . بهتر است فاصله شبکه‌ای تعادل (بردار شبکه‌ای) را

$$b = x_{(i+1)_0} - x_{i_0}$$

تعریف کنیم و فرض کنیم که زنجیر طویل است* یعنی $L \gg b$ $(N \gg 1)$.

با اعمال معادلات هامیلتون به (۱۰–۵۷) ، معادلات حرکت زیر را برای جرم i ام به‌دست می‌آوریم

$$\dot{\eta}_i = \frac{P_i}{m} \qquad \text{و} \qquad \dot{P}_i = K(\eta_{i+1} - \eta_i) - K(\eta_i - \eta_{i-1}) \qquad (۵۸ - ۱۰)$$

از ترکیب این معادلات خواهیم داشت

$$m\ddot{\eta}_i = K(\eta_{i+1} - 2\eta_i + \eta_{i-1}) \qquad (i = 1 \ldots N) \qquad (۵۹ - ۱۰)$$

معادلات (۱۰–۵۹) مجموعه‌ای از N معادله دیفرانسیل معمولی جفت شده تشکیل می‌دهند زیرا η_{i+1} و η_{i-1} هردو در معادله دیفرانسیل i ام ظاهر می‌شوند . معادلاتی از این قبیل برای مهندسین برق که با تجزیه و تحلیل مدارهای خطی سروکار دارند آشنا است . جوابهای آنها معمولا" با استفاده از تبدیلات خطی (به‌عنوان مثال ، آنالیز فوریه) به‌دست می‌آیند .

جفت‌شدگی در (۱۰–۵۹) از جملات ضربدری $\eta_{i+1}\eta_i$ در هامیلتونی (۱۰–۵۷) ناشی می‌شود . این جملات به‌نوبه خود مربوط به‌برهم‌کنشهای بین جرمهای مجاوراند . اگر این جملات نبودند ، هامیلتونی یک سیستم از نوسانگرهای جفت نشده را نشان می‌داد . ممکن است یک تبدیل خطی به‌یک مجموعه جدید متغیرهای بندادی ، ξ_n و p_n پیدا کرد ، که در آنها هامیلتونی جدید دارای جمله‌های ضربدری نباشد . به‌بیان‌دیگر ، ممکن است برهم‌کنشها را حذف کرد و مسئله جدیدی ایجاد کرد که شامل نوسانگرهای جفت‌نشده باشد . برای انجام این کار ،

---

* توجه‌کنیدکه جرمهای واقع در دوانتهای زنجیر تنها یک جرم همسایه دارند و لذا از نظر دینامیکی باجرمهای درون زنجیرمتفاوتند .لیکن وقتی زنجیر طویل باشد "آثار انتهائی" قابل اغماض است .

$$\eta_i = \sum_{n=1}^{N} a_{in}\xi_n \qquad (۱۰-۶۰ \text{ الف})$$

و

$$P_i = \sum_{n=1}^{N} m a_{in} p_n \qquad (۱۰-۶۰ \text{ ب})$$

را وارد می‌کنیم . با استفاده از رابطه $P_i = m\dot{\eta}_i$ ، نتیجه می‌گیریم $p_n = \dot{\xi}_n$ به‌طوری که مختصات و تکانه‌های بهنجار ξ_n و p_n سیستمهایی با جرم واحد را نمایش می‌دهند .

ضرائب a_{in} باید طوری انتخاب شوند که وقتی (۱۰-۶۰) در (۱۰-۵۷) قرارداده‌شد ، هامیلتونی جدید به‌صورت

$$H = \sum_{n=1}^{N} (\tfrac{1}{2}p_n^2 + \tfrac{1}{2}\omega_n^2\xi_n^2) \qquad (۱۰-۶۱)$$

درآید . هامیلتونی جدید باید معرف مجموعه‌ای از N نوسانگر جفت‌نشده‌باشد که هرکدام دارای جرم واحد ویک فرکانس‌مشخصه ω_n باشد . بعلاوه ،هرنوسانگر یامد بهنجار یک‌مجموعه از p_n و ξ_n های خاص خود را دارد . با اعمال معادلات بندادی هامیلتون به (۱۰-۶۱) ، برای هر ξ_n معادله حرکتی به‌دست می‌آوریم که جواب آن عبارت است از*

$$\xi_n = A_n e^{-i\omega_n t} \qquad (۱۰-۶۲)$$

A_n یک دامنه مختلطی‌است (دامنه و فاز) که باید از شرایط‌اولیه تعیین شود .به‌محض اینکه فرکانسهای بهنجار ω_n برای هر مد شناخته شدند و ضرایب a_{in} تعیین شدند ، (۱۰-۶۰) می‌تواند برای تعیین حرکت جرم نقطه‌ای i ام به‌صورت

$$\eta_i(t) = \sum_{n=1}^{N} a_{in} A_n e^{-i\omega_n t} \qquad (۱۰-۶۳)$$

به‌کار رود .

برای محاسبه ω_n و a_{in} ، (۱۰-۶۳) را در معادله حرکت (۱۰-۵۹) قرار می‌دهیم و نتیجه می‌گیریم

$$m\ddot{\eta}_i = K(\eta_{i+1} - 2\eta_i + \eta_{i-1})$$

---

* در (۱۰-۶۲) و (۱۰-۶۳) فقط قسمت حقیقی معرف حرکت فیزیکی است .

یا

$$\sum_{n=1}^{N} -m\omega_n^2 a_{in} A_n e^{-i\omega_n t} = \sum_{n=1}^{N} K(a_{i+1,n} - 2a_{in} + a_{i-1,n}) A_n e^{-i\omega_n t} \qquad (۶۴-۱۰)$$

چون (۱۰–۶۴) باید برای هرشرایط اولیه‌ای معتبرباشد ، باید برای تمام A_n ها برقرارباشد. این فقط در صورتی ممکن است که ضرایب متناظر A_n در طرفهای راست و چپ برابر باشند ، یعنی ،

$$-m\omega_n^2 a_{in} = K(a_{i+1,n} - 2a_{in} + a_{i-1,n}) \qquad (i = 1, \ldots, N) \qquad (۶۵-۱۰)$$

معادله (۱۰–۶۵) مجموعه‌ای از N معادله جبری خطی همگن برای مجهولهای a_{in} تشکیل می‌دهند . جوابهای غیر بدیهی $(a_{in} \neq 0)$ فقط برای بعضی از مقادیر ω_n^2 وجود دارند. این مقادیربه‌وسیله این شرط‌که دترمینان ضرایب a_{in} در (۱۰–۶۵) صفرباشد به‌دست می‌آیند. بدین‌ترتیب به‌یک معادله جبری درجه N که N ریشه آن مقادیرمجاز ω_n^2 را به‌دست می‌دهند، هدایت می‌شویم . هرکدام از مقادیر ω_n مجددا" در (۱۰–۶۵) گذاشته می‌شود و مجموعه متناظر ضرائب a_{in} به‌دست می‌آیند .

محاسبه فرکانسهای بهنجار ω_n و مجموعه متناظر ضرایب a_{in} حتی‌برای‌شبکه‌های‌نسبتا" کوچک فوق‌العاده مشکل است . نکته عجیب اینکه ، برای مقادیر خیلی بزرگ N ، پیداکردن جوابهای (۱۰–۶۵) با استفاده از استدلالات مبتنی بر تقارن انتقالی سیستم امکان‌پذیر می‌شود . اگر $N \to \infty$ ، یک انتقال شبکه به‌اندازهٔ مضربی از ثابت شبکه‌ای b هامیلتونی را دست‌نخورده‌باقی می‌گذارد .این موضوع پیشنهاد می‌کند که ضرایب موجود در (۱۰–۶۵) را به‌صورت

$$a_{in} = \frac{1}{(Nm)^{1/2}} \exp(ik_n x_{i_0}) \qquad (۶۶-۱۰)$$

اختیار کنیم که در آن k_n (بردار موج) ثابتی است که بستگی به مد دارد ؛ به‌طور معادل ، در یک مد داده شده حرکتهای جرمهای نقطه‌ای حداکثر در فاز با هم تفاوت دارند .از جایگذاری (۱۰–۶۶) در (۱۰–۶۵) محقق می‌شودکه "حدس" ما درصورتی درست‌است که‌داشته باشیم

$$\begin{aligned} -m\omega_n^2 &= K\{\exp[ik_n(x_{(i+1)_0} - x_{i_0})] - 2 + \exp[-ik_n(x_{i_0} - x_{(i-1)_0})]\} \\ &= 2K[\cos k_n b - 1] \end{aligned}$$

یا

$$\omega_n = \left(\frac{K}{m}\right)^{1/2} \sin \frac{1}{2} k_n b \qquad (۶۷-۱۰)$$

وقتی بردارهای موج مد معلوم شدند ، ضرایب (۱۰–۶۶) و فرکانسهای (۱۰–۶۷) می‌توانند به‌دست آیند . معادله (۱۰–۶۷) مثالی است از یک *رابطه پاشندگی* ، یعنی ، رابطه‌ای بین ω_n و k_n برای شبکه .

یک راه نسبتا" جالب برای پیداکردن مقادیر k_n تحمیل شرایط‌مرزی روی جرمهای اول و آخر زنجیر است . وقتی $N \to \infty$ ، می‌توان تصور کرد که هردو نقطه مرزی به‌بینهایت می‌روند . به‌طور معادل ، می‌توان شرط کرد که هردو حرکتهای یکسانی داشته باشند (شرایط دوره‌ای بورن ــ فون‌کارمن[۵]) . از نظر ریاضی شرط می‌کنیم که

$$\eta_1(t) = \eta_N(t) \qquad (۶۸-۱۰)$$

یا ، از (۱۰–۶۰) ،

$$\sum_{n=1}^{N} a_{1,n}\, \xi_n(t) = \sum_{n=1}^{N} a_{N,n}\, \xi_n(t)$$

چون این رابطه باید برای هر زمانی معتبر باشد ، باید داشته باشیم

$$a_{1,n} = a_{N,n}, \qquad \exp(ik_n x_{1_0}) = \exp(ik_n x_{N_0})$$

یا

$$\exp[ik_n(x_{N_0} - x_{1_0})] = e^{ik_n L} = 1 \quad (\text{برای هر } n) \qquad (۶۹-۱۰)$$

معادله (۱۰–۶۹) در صورتی و فقط در صورتی می‌تواند برقرار باشد که*

$$k_n = \frac{2\pi n}{L} \qquad (n = 1, \ldots, N) \qquad (۷۰-۱۰)$$

فرکانسهای بهنجار و ضرائب (۱۰–۶۷) و (۱۰–۶۶) به‌شکل

---

۵ — Von Karman

* این انتخاب بخصوص برای n تا حدی دلخواه است و هرمجموعه از N عدد صحیح متوالی می‌تواند مورد استفاده قرار گیرد .

$$\omega_n = \left(\frac{K}{m}\right)^{1/2} \sin \frac{\pi b n}{L}$$

و

$$a_{in} = \frac{1}{(Nm)^{1/2}} \exp\left(\frac{i2\pi x_{io} n}{L}\right) \qquad (۷۱ - ۱۰)$$

در می‌آیند . عبور به‌نظریه کوانتومی به‌وسیله جایگذاریهای

$$\eta_i \to \hat{\eta}_i, \qquad P_i \to \hat{P}_i, \qquad \xi_n \to \hat{\xi}_n, \qquad p_n \to \hat{p}_n$$

و

$$\mathscr{H} \to \hat{\mathscr{H}} = \sum_{n=1}^{N} \frac{\hat{p}_n \hat{p}_n}{2} + \frac{1}{2} \omega_n{}^2 \hat{\xi}_n \hat{\xi}_n \qquad (۷۲ - ۱۰)$$

انجام می‌گیرد . معادله شرودینگر حاصله تفکیک‌پذیر است (زیرا برهم‌کنش وجود نـدارد) و ویژه مقدارهای کل به‌وسیله حاصل‌جمع

$$E_{tot} = \sum_{n=1}^{N} \varepsilon_{\nu_n}^{(n)} = \sum_{n=1}^{N} (\nu_n + \tfrac{1}{2})\hbar\omega_n \qquad (\nu_n = 0, 1, 2, \ldots) \qquad (۷۳ - ۱۰)$$

داده می‌شوند . حالت ارتعاشی شبکه با معلوم‌بودن اعداد صحیح ν_n وابسته به‌برانگیختگی برای هرکدام از نوسانگرهای مد بهنجار معلوم می‌شود . حالت پایه شبکه وقتـی به‌تحقـق می‌پیوندد که تمام ν_n ها صفر باشند .
انرژی متناظر با " نقطه صفر" شبکه عبارت است از

$$E_{\substack{\text{ground}\\ \text{state}}} = \sum_{i=1}^{N} \tfrac{1}{2}\hbar\omega_n \qquad (۷۴ - ۱۰)$$

هم‌ارزی بین یک شبکه کشسان و یک مجموعه از نوسانگرهای مستقل بهنجار فرمولبندی نظری نسبتا" ساده‌ای برای ارتعاشات شبکه ممکن می‌سازد . این روش در توضیح رفتار حرارتـی و صوتی مشاهده شده جامدات کاملا" مفید است .

یک راه جالب برای تعبیر طیف انرژی شبکه (۱۰ـ۷۳) وجود دارد . مفهوم یک شبـه ذره به‌نام فونون را وارد می‌کنیم .هر فونون یک فرکانس ω_n و یک انرژی $\hbar\omega_n$ دارد . به‌هرمد بهنجار یک چنین فونونی با همان فرکانس وابسته می‌کنیم . اعداد صحیح برانگیختگی ν_n به عنوان تعداد فونونهای موجود با فرکانس ω_n تعبیر می‌شوند . وقتی هیچ فونونی حضـور

نداشته باشد ، یعنی ، تمام ν_n ها صفر باشند ، یک "حالت تهی" با انرژی

$$\sum_{n=1}^{N} \tfrac{1}{2}\hbar\omega_n$$

داریم . چون عدد فونونی ν_n ممکن است تغییر کند ، فونونها می‌توانند ایجاد شوند یا از بین بروند . بعلاوه ، چون ν_n می‌تواند بزرگتر از یک باشد ، بیش از یک فونون می‌توانند دارای یک انرژی $\hbar\omega_n$ باشند . بنابراین ، فونونها می‌توانند به‌عنوان بوزونهای تمیزناپذیر در نظر گرفته شوند که از آمار بوز ــ اینشتین پیروی می‌کنند . اما چون فونونها از نظر تعداد پایسته نیستند ، پتانسیل شیمیائی باید مساوی با صفر قرار داده شود و توزیع فونونی خواهد شد

$$\bar{\nu}_n = \frac{1}{e^{\hbar\omega_n/k_B T} - 1} \qquad (n = 1, \ldots, N) \qquad (۷۵ - ۱۰)$$

این رابطه ، توزیع پلانک برای فوتونها (۱ــ۳۲) را به‌یاد می‌آورد . فوتونها کوانتای میدان الکترومغناطیسی هستند .

دوقسمت اول این کتاب عمدتا" با نظریه کوانتومی ذرات غیرنسبیتی سروکار داشت . فرض اینکه تمام تصحیحات نسبیتی می‌توانند از معادلهای کلاسیکی‌شان نتیجه شوند نادرست است . به‌عنوان مثال ، از جملات ساختار ریز نسبیتی در هیدرژن فقط جمله مربوط به‌تغییر جرم قابل اقتباس از یک شکل کلاسیکی است . جمله اسپین ــ مداری و جمله داروین هیچ‌همتای کلاسیکی ندارند . درحالی‌که ممکن است برهم‌کنش اسپین ــ مداری را با استفاده از مقایسه بین $\hat{\mathbf{S}}$ و $\hat{\mathbf{L}}$ توضیح داد ، جمله داروین هیچگونه معادل کلاسیکی ندارد و یک بررسی کوانتومی نسبیتی را طلب می‌کند . در فصل ۱۱ خواهیم دید که هر سه جمله ساختار ریز مستقیما" از معادله دیراک برای الکترون نسبیتی نتیجه می‌شوند .

مسائل

۱۰–۱ جابه‌جائی اولین خط بالمر در هیدرژن را وقتی‌که حرکت هسته‌ای در نظر گرفته‌می‌شود پیدا کنید. این جابه‌جایی را با تصحیحات ساختار ریز مقایسه کنید.

۱۰–۲ مجموعه‌ای از اتمهای هیدرژن را در یک جعبه بزرگ در نظر بگیرید که هرکدام به‌وسیله $\psi = e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}}\psi_i(\mathbf{r})$ مشخص می‌شوند. علاوه بر عوامل داخلی (به‌عنوان مثال، ساختار ریز، تصحیحات مربوط به‌جرم کاهش یافته، و غیره) آیا هیچ اثر کلاسیکی دیگری ناشی از انتقال، وجود دارد که بتواند روی‌طیف گسیلی اتمها تاثیر بگذارد؟ عبارتی برای این اثر بنویسید.

۱۰–۳ (الف) نشان دهید که وقتی یک جرم متحرک به‌یک جرم مشابه دیگری که در آغاز در حال سکون بوده است برخورد کند، جرم اول هرگز نمی‌تواند نسبت به‌امتداد اولیه‌اش، وقتی در دستگاه مقایسه آزمایشگاهی مشاهده‌شود، بیش از 90° منحرف شود (راهنمائی: از رابطه

$$\frac{\sin\theta}{\cos\theta + 1} = \tan\frac{\theta}{2}$$

استفاده کنید).

(ب) با استفاده از معادله (۱۰–۵) و رابطه‌ای که بعداز (۱۰–۸) آمده است نشان دهید که مقطع موثرهای آزمایشگاهی و مرکز جرمی با رابطه

$$\sigma_{\text{lab}} = \left\{\frac{[1 - (m/M)^2 + 2(m/M)\cos\theta_{\text{c.m.}}]^{3/2}}{1 + (m/M)\cos\theta_{\text{c.m.}}}\right\}\sigma_{\text{c.m.}}$$

به‌یکدیگر مربوط می‌شوند.

۱۰–۴ تابع وردشی برای اتم هلیوم که درمعادله (۱۰–۱۵) داده شده‌است، می‌تواند به‌صورت

$$\Psi_{\text{Var}}(1, 2) = \psi(1)\psi(2)$$

نوشته شود که در آن

$$\psi(r) = \left(\frac{Z'}{\pi a^3}\right)^{1/2} e^{-Z'r/a}$$

و " بار موثر" عبارت است از $Z' = \frac{27}{16}$.

(الف) چگالی بار در اطراف هسته را پیدا کنید . (راهنمائی : فرض کنید که چگالی الکترونی عبارت است از مجموع چگالیهای احتمال وابسته به‌هرتابع الکترونی) .

(ب) تحقیق کنید که پتانسیل الکتروستاتیکی در اطراف هسته عبارت است‌از

$$\phi(r) = 2e\left(\frac{1}{r} + \frac{Z'}{a}\right)e^{-2Z'r/a}$$

(راهنمائی : از معادله پواسن استفاده کنید)

۱۰–۵ (الف) نشان دهید که انرژی متوسط هر ذره یک گاز ایده‌آل فرمی در $T = 0$ عبارت است از

$$\bar{\varepsilon} = \tfrac{3}{5}\varepsilon_F$$

(ب) نشان دهید که انرژی جنبشی کل گاز الکترونی اتمی ، طبق مدل توماس–فرمی عبارت است از

$$T = \int \tau(r)\, d\mathbf{r} = \int \frac{\hbar^2(3\pi^2)^{5/3}}{10m\pi^2}\,[\rho(r)]^{5/3}\, d\mathbf{r}$$

(ج) عبارتی برای انرژی کل اتم توماس – فرمی برحسب $\rho(r)$ بنویسید .

۱۰–۶ با استفاده از معادله (۱۰–۳۶) و مقادیر نقایص کوانتومی داده شده در متن ، طول موج خط زرد مشخصه سدیم را محاسبه کنید . این خط به‌وسیله الکترون ظرفیت‌درگذار $3p \to 3s$ گسیل می‌شود .

۱۰–۷ یک اتم Z الکترونی‌که درآن هرالکترون به‌طورمستقل دریک پتانسیل الکتروستاتیکی پوشش شده $V(\mathbf{r})$ حرکت می‌کند در نظر بگیرید .

(الف) نشان دهید که برای هر الکترون رابطهٔ زیر برقرار است

$$[\hat{z}, \mathscr{H}] = \frac{i\hbar}{m}\,\hat{p}_z$$

$\mathscr{H} = (\hat{p}^2/2m) + V(\mathbf{r})$ هامیلتونی هرالکترون است .

(ب) با استفاده از نتیجه بالا نشان دهید که

$$(\varepsilon_i - \varepsilon_j)\langle\varepsilon_j|\hat{z}|\varepsilon_i\rangle = \frac{i\hbar}{m}\langle\varepsilon_j|\hat{p}_z|\varepsilon_i\rangle$$

(ج) هردو طرف را در z_{ij} ضرب کنید و روی j جمع بندی‌کنید، وبا استفاده‌از قواعد ضرب ماتریسها نشان دهید که

$$\sum_{j=1}^{\infty} (\varepsilon_i - \varepsilon_j)|z_{ji}|^2 = \frac{i\hbar}{m}(\hat{z}\hat{p}_z)_{ii}$$

یا ، با مزدوج‌کردن دوطرف ،

$$\sum_{j=1}^{\infty} (\varepsilon_i - \varepsilon_j)|z_{ji}|^2 = -\frac{i\hbar}{m}(\hat{p}_z\hat{z})_{ii}$$

(د) با جمع‌کردن معادلات فوق ، نشان دهید که

$$\sum_{j=1}^{\infty} (\varepsilon_j - \varepsilon_i)|z_{ji}|^2 = \frac{\hbar^2}{2m}$$

و

$$\sum_{i=1}^{Z} \sum_{j=1}^{\infty} (\varepsilon_j - \varepsilon_i)\,|\mathbf{r}_{ji}|^2 = \frac{3\hbar^2}{2m} Z$$

که در آن

$$|\mathbf{r}_{ji}|^2 = |x_{ji}|^2 + |y_{ji}|^2 + |z_{ji}|^2$$

نتیجه فوق به‌قاعده جمع نوسانگر موسوم است .

۱۰ـ۸ یک اتم هلیوم در نظر بگیرید که تابع حالت پایه (^1S) آن عبارت است از

$$\Psi_{He}(1, 2) = \psi^{A}_{100}(1)\psi^{A}_{100}(2)\left\{\frac{|\tfrac{1}{2}\rangle^{(1)}|-\tfrac{1}{2}\rangle^{(2)} - |\tfrac{1}{2}\rangle^{(2)}|-\tfrac{1}{2}\rangle^{(1)}}{\sqrt{2}}\right\}$$

ψ^{A} از نظر شکل هیدرژنی است و نسبت به‌هسته A در نظر گرفته شده است .

(الف) تابع کل سیستمی را که مرکب از اتم هلیوم فوق و یک اتم هیدرژنی در حالت پایه ، با هسته B ، است ، وقتی دو اتم دور از یکدیگر قرار دارند بنویسید .

(ب) نشان دهید که وقتی دو اتم پهلوی هم آورده شوند ، تنها حالت با تقارن مناسب حالتی است که در آن اثرهای تبادلی ، دافعه ایجاد می‌کنند . به‌طور معادل ، نشان دهیدکه یک‌اتم هلیوم نمی‌تواند یک پیوند پایدار با هیدرژن تشکیل دهد. این

نتیجه را تعمیم دهید و نشان دهید که آثار تبادلی بین اتمهای گاز بی‌اثر منجر به دافعه می‌شوند .

۱۰–۹ در پیوند یونی مولکول NaCl ، الکترون ظرفیت اتم سدیم به اتم کلر منتقل می‌شود. یون Na^+ شبیه به اتم نئون که به‌طور مثبت باردار شده است می‌باشد در صورتی که Cl^- کاملا" شبیه به اتم آرگون که به‌طور منفی باردار شده است می‌باشد . بر پایه نتایج مسئله ۱۰–۸ ویژگیهای دافعه و جاذبه پیوند یونی پایدار را توضیح دهید .

۱۰–۱۰ یک پتانسیل مولکولی به‌شکل

$$U(R) = -\frac{A}{R} + \frac{B}{R^2}$$

درنظر بگیرید .

(الف) محل تعادل و انرژی تجزیه مولکول را برحسب A و B پیدا کنید .

(ب) با استفاده از (۱۰–۴۷) عبارتهای تقریبی برای طیفهای دورانی و ارتعاشی برحسب A و B پیدا کنید .

۱۰–۱۱ نشان دهید که معادله (۱۰–۵۶) از معادله (۱۰–۵۵) نتیجه می‌شود .

۱۰–۱۲ رابطه پاشندگی مناسب $\omega = \omega(k)$ در شبکه یک بعدی را وقتی که بعداز نزدیکترین همسایه‌ها را شامل می‌شود پیدا کنید .

۱۰–۱۳ عبارت انرژی‌کل یک شبکه مرتعش یک بعدی در دمای T را با فرض اینکه شبکه به‌وسیله یک گاز فونونی ایده‌آل نمایانده می‌شود بنویسید . گاز فونونی بوزونهائی هستند که در آمار بوز–اینشتین ، با $\mu = 0$ ، صدق می‌کنند .

مراجع پیشنهادی

Bethe, H. A., and Jackiw, R. W., "Intermediate Quantum Mechanics." 2nd ed. Benjamin, New York, 1968.

Bethe, H. A., and Salpeter, E. E., "Quantum Mechanics of One and Two Electron Atoms." Springer-Verlag, Berlin, 1957.

Borowitz, S., "Fundamentals of Quantum Mechanics." Benjamin, New York, 1967.

Condon, E. U., and Shortley, G. H., "The Theory of Atomic Spectra." Cambridge Univ. Press, London and New York, 1963.

Eisberg, R. M., "Fundamentals of Modern Physics," Chapter 13. Wiley, New York, 1961.

Goldstein, H., "Classical Mechanics," Chapter 3. Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1950.

Heitler, W., "Elementary Wave Mechanics," 2nd ed. Oxford Univ. Press, London and New York, 1956.

Stehle, P., "Quantum Mechanics." Holden-Day, San Francisco, 1966.

قسمت سوم

مکانیك کوانتومی نسبیتی ونظریه‌میدانها

۱۱

مکانیك کوانتومی نسبیتی

در یک بحث دقیق نظریه کوانتومی نسبیتی از فرمولبندی هموردایی استفاده می‌شود که در آن تمام قوانین در یک فضای چهاربعدی که‌زمان به‌عنوان بعد چهارم آن به‌کار می‌رود ،بیان می‌شوند . مزیت این صورتبندی در این‌است که متغیرهای زمانی و فضایی خود به‌خود به‌طور متقارن در نظر گرفته می‌شوند. هم‌چنین این اطمینان‌رامی‌دهد که قوانین به‌دست‌آمده ،تحت‌تبدیلات لورنتس[1] ،که بین مشاهده‌پذیرها ازدید دوناظرکه‌نسبت‌به‌یکدیگر با سرعت‌ثابت حرکت می‌کنند ارتباطی ایجاد می‌کنند ، تغییرناپذیراند .

برای احتراز از پیچیدگیهای یک بررسی هموردا ، تمام کمیتهای نسبیتی در یک فضای سه‌بعدی معمولی بیان خواهند شد . نتایج به‌دست‌آمده در صورتی صحیح فرض می‌شوند که :

(الف) با همتاهای کلاسیکی خود سازگار باشند ،

(ب) نسبت به‌متغیرهای زمانی و فضائی متقارن باشند ،

(ج) وقتی $v \ll c$ باشد به‌نتایج نظریه شرودینگر منتهی شوند .

۱ــ معادله کلاین ــ گوردون

معادله حرکت شرودینگر می‌تواند با وارد کردن عملگر انرژی ، $\mathscr{E} = i\hbar\, \partial/\partial t$ ، به‌دست آید . از مساوی قراردادن این عملگر با عملگرهامیلتونی ، خواهیم داشت

$$\mathscr{H}\Psi = \mathscr{E}\Psi = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right\}\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \qquad (۱-۱۱)$$

۱ــ Lorentz

که همان‌نتیجه مطلوب‌است .از تامل در (۱۱ــ۱) آشکار می‌شودکه معادله شرودینگربه‌عنوان یک معادله نسبیتی قابل‌قبول نیست زیرا از نظر فضائی‌مشتقات مرتبه دوم (یعنی ، ∇^2)ولی از نظر زمانی فقط‌مشتقات مرتبه اول را در بردارد . دو انتخاب داریم .یا معادله‌ای ایجاد کنیم که نسبت به‌زمان از مرتبه دوم باشد (معادله کلاین ــگوردون) یا اینکه هامیلتونی را نسبت به‌عملگر تکانه خطی کنیم (معادله دیراک) . هردو انتخاب باید در حد غیرنسبیتی به‌معادله شرودینگر تقلیل پیدا کنند ، و در مورد یک ذره در یک میدان الکترو مغناطیسی ، هردو باید با رابطه کلاسیکی نسبیتی*

$$c^2(\mathbf{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A})^2 + m^2c^4 = (\varepsilon - q\Phi)^2 \qquad (۲-۱۱)$$

سازگار باشند .

با دنبال‌کردن روش کلاین و گوردون ، جایگذاریهای

$$\varepsilon \to \hat{\mathscr{E}} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \qquad \text{و} \qquad \mathbf{p} \to \hat{\mathbf{p}} = \frac{\hbar}{i}\nabla$$

را در (۱۱ــ۲) اعمال می‌کنیم و معادله KG را به‌شکل

$$\left\{c^2\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{q}{c}\mathbf{A}\right)^2 + m^2c^4\right\}\Psi = \left\{\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - q\Phi\right)^2\right\}\Psi \qquad (۳-۱۱)$$

به‌دست می‌آوریم .

این معادله ابتدا توسط خود شرودینگر در نظر گرفته شد ، ولی به‌علت اینکه منجر به‌احتمالات منفی می‌شد از آن صرفنظر کرد . معادله KG با شرایط(الف) و (ب) مذکور در فوق سازگار است .

برای میدانهای الکتریکی و مغناطیسی ایستا داریم

$$\left(\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = \frac{\partial \Phi}{\partial t} = 0\right)$$

و معادله کلاین ــگوردون می‌شود

---

* از m (به‌جای m_0) برای جرم در حال سکون استفاده می‌کنیم .معادله (۲ــ۸۶)از فصل ۲ را به‌بینید .

$$\left\{c^2\left(\frac{\hbar}{i}\nabla-\frac{q}{c}\mathbf{A}\right)^2+m^2c^4\right\}\Psi=\left\{-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial t^2}-2i\hbar q\Phi\frac{\partial}{\partial t}+q^2\Phi^2\right\}\Psi \qquad (۴-۱۱)$$

بعداً" نشان خواهیم داد که معادله KG وقتی $v/c\to 0$ ، به‌معادله شرودینگر تقلیل پیدا می‌کند. یادآوری کنیم که، از نظر نسبیتی، انرژی کل ε ی یک سیستم شامل یک قسمت سکون mc^2 است که باید در تابع حالت مکانیک کوانتومی منعکس شود، لذا بستگی به mc^2 را با بیان تابع حالت به‌شکل

$$\Psi=e^{-imc^2t/\hbar}\Psi_{\text{kin}} \qquad (۵-۱۱)$$

جدا می‌کنیم. قسمت جنبشی Ψ_{kin} جمله‌ای است‌که باید با تابع حالت غیرنسبیتی‌شرودینگر مقایسه شود. با قراردادن (۱۱ــ۵) در (۱۱ــ۴)، معادله KG برای قسمت جنبشی به‌صورت زیر به‌دست می‌آید

$$\left\{c^2\left(\hat{\mathbf{p}}-\frac{q}{c}\mathbf{A}\right)^2+m^2c^4\right\}\Psi_{\text{kin}}=\left\{\left(-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial t^2}+2i\hbar(mc^2-q\Phi)\frac{\partial}{\partial t}\right)\right.$$
$$\left.-[q\Phi(2mc^2-q\Phi)+m^2c^4]\right\}\Psi_{\text{kin}}$$

یا

$$\left\{c^2\left(\hat{\mathbf{p}}-\frac{q}{c}\mathbf{A}\right)^2\right\}\Psi_{\text{kin}}=\left\{-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial t^2}+2i\hbar(mc^2-q\Phi)\frac{\partial}{\partial t}\right.$$
$$\left.-q\Phi(2mc^2-q\Phi)\right\}\Psi_{\text{kin}} \qquad (۶-۱۱)$$

اما، اگر ذره غیرنسبیتی باشد، انرژی سکون غالب است و جملاتی که در طرف راست (۱۱ــ۶) شامل mc^2 نیستند می‌توانند حذف شوند. لذا برای $v\ll c$ داریم

$$\left\{\frac{(\hat{\mathbf{p}}-(q/c)\mathbf{A})^2}{2m}+q\Phi\right\}\Psi_{\text{kin}}=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi_{\text{kin}} \qquad (۷-۱۱)$$

که تحت عنوان معادله شرودینگر شناخته خواهد شد. چون ویژگیهای اسپینی در معادله KG حضور ندارند این معادله حاکم بر رفتار بوزونهای بدون اسپین، به‌عنوان مثال، مزونهای π ، خواهد بود.

می‌توان فرض کرد که ویژه حالتهای مانای یک ذره KG با زمان به‌صورت

$$\Psi=e^{-i\varepsilon_i t/\hbar}\psi_i(\mathbf{r})$$

تحـول پیدا می‌کنند . از قراردادن این عبارت در (۱۱ــ۴) ، معادله ویژه‌مقداری انرژی KG به‌صورت

$$\left\{c^2\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c}\mathbf{A}\right)^2 + m^2c^4\right\}\psi_i(\mathbf{r}) = (\varepsilon_i - q\Phi)^2\psi_i(\mathbf{r}) \qquad (۸-۱۱)$$

به‌دست می‌آید . اگر (۱۱ــ۸)را در مورد یک الکترون هیدرژنی که در آن $q = -e$، $\mathbf{A} = \mathbf{0}$ ، و $\Phi = e/r$ است به‌کار بریم ، می‌توانیم نشان دهیم‌که اثرات اسپینی ظاهر نمی‌شوند . چون این یک مسئله نیروی مرکزی است ، (۱۱ــ۸) با به‌کارگیری

$$\psi_i = R_{nl}(r)Y_{lm_l}(\theta, \phi)$$

تفکیک‌پذیر است . مثل مورد غیرنسبیتی ، معادله شعاعی طیف انرژی اتم را تعیین می‌کند . بدون اثبات* متذکر می‌شویم که R_{nl} فقط در صورتی در شرایط حالت مقید صدق می‌کند که انرژی توسط

$$\varepsilon_{nl} = mc^2\left[1 + \frac{\gamma^2}{\{n - (l + \frac{1}{2}) + [(l + \frac{1}{2})^2 - \gamma^2]^{1/2}\}^2}\right]^{-1/2}$$
$$(n = 1, 2, 3 \ldots; \quad l = 0, 1, \ldots, n-1) \qquad (۹-۱۱)$$

که در آن $\gamma = e^2/\hbar c = 1/137$ ثابت ساختار ریز است ،داده‌شده‌باشد.درحد غیرنسبیتی**، با استفاده از $\gamma \ll 1$ ، ترازهای "هیدرژنی" خواهند شد

$$\varepsilon_{nl} \simeq mc^2\left\{1 - \frac{\gamma^2}{2n^2} - \frac{\gamma^4}{2n^4}\left(\frac{n}{l + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4}\right)\right\} + (\text{جملاتی از مرتبه } \gamma^6)$$
$$(۱۰-۱۱)$$

---

* به‌عنوان مثال به‌کتاب زیر مراجعه کنید

L.I. Schiff,"Quantum Mechanics," 3rd ed. P.470, Mc Graw-Hill, New York 1968.

** در واقع می‌توان اثبات کرد که سرعت الکترون در اولین مدار بوهر برابـــر $v = e^2/\hbar$ است . بنابراین رابطه $\gamma = e^2/\hbar c = v/c = 1/137 \ll 1$ نشان می‌دهد که الکترون در یک حالت مقید هیدرژن به‌وضوح غیرنسبیتی است .

جمله اول دقیقاً" انرژی سکون ذره است . جمله بعدی عبارت است از

$$-\frac{mc^2\gamma^2}{2n^2} = \frac{\varepsilon_1}{n^2} = \varepsilon_n$$

که همان فرمول بوهر است . جملات آخر از ساختار ریز ناشی می‌شوند و به‌صورت زیر در می‌آیند

$$\varepsilon_{fs} = \varepsilon_n \frac{\gamma^2}{n}\left[\frac{1}{(l+\frac{1}{2})} - \frac{3}{4n}\right] \qquad (۱۱-۱۱)$$

از مقایسه این نتیجه با (۷-۵۱) می‌بینیم که (۱۱-۱۱) در صورتی صحیح خواهد بودکه l ، به‌جای عدد صحیح ،عدد نیمه‌صحیح (یعنی ، $l = j$) باشد .مسلماً" ، (۱۱-۱۱) معرف‌ساختار ریزبدون اسپین ،مثل مورد یک اتم‌مزونی (به‌عنوان مثال ،یک اتم هیدرژن که به‌جای‌الکترون آن یک مزون π نشسته است) مـی‌باشد .

۲ـ معادله دیراک

دیراک در یک مقاله کلاسیک (۱۹۲۸)یک شق دیگری‌ازمعادله کلاین ـگوردون راارائه نمود . این معادله در حالی که تمام خواسته‌های نسبیتی را تامین می‌کرد ، وجود یک اسپین ذاتی را در حد غیرنسبیتی نیز ایجاب‌می‌کرد . نه‌تنها این اسپین برابر با $\frac{1}{2}$ بود ، بلکـه جملات ساختار ریز که برای یک ذره دیراک در یک میدان کولنی به‌دست می‌آمدند باجملات مشاهده شـده در طیف هیدرژن توافق داشتند . تردیدی نیست که الکترون نسبیتی ذره‌ای است که از معادله دیراک پیروی می‌کند . یعنی ، یک ذره دیراک است .

دیراک شکل خطی معادله شرودینگر ، یعنی

$$\mathscr{H}\Psi = \hat{\mathscr{E}}\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \qquad (۱۲-۱۱)$$

را انتخاب کرد . چون $\mathscr{H}$ باید نسبت به $\hat{\mathbf{p}}$ خطی باشد ، دیراک شکل

$$\mathscr{H} = c\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\mathbf{p}} + \hat{\beta}m_0c^2 \qquad (۱۳-۱۱)$$

را پیشنهاد کرد . ماهیت عملگرهای هرمیتی $\hat{\boldsymbol{\alpha}}$ و $\hat{\beta}$ در زیر تعیین خواهد شد . بااستفاده‌از

جایگذاریهای (جایگذاری "کمینه‌ای")

$$\hat{\mathbf{p}} \to \hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c}\mathbf{A} \qquad \text{و} \qquad \hat{\mathscr{E}} \to \hat{\mathscr{E}} - q\Phi \qquad (۱۴-۱۱)$$

معادله حرکت دیراک (۱۱–۱۲) برای یک ذره در یک میدان الکترومغناطیسی خواهد شد

$$\left\{c\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c}\mathbf{A}\right) + \hat{\beta} m_0 c^2\right\}\Psi = \left\{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q\Phi\right\}\Psi \qquad (۱۵-۱۱)$$

با "مجذور"کردن (تأثیردادن مجدد عملگرها) طرفین (۱۱ – ۵) نتیجه می‌گیریم

$$\left\{c\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c}\mathbf{A}\right) + \hat{\beta} m c^2\right\}^2\Psi = \left\{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q\Phi\right\}^2\Psi \qquad (۱۶-۱۱)$$

طرف راست همان‌طرف راست معادله KG است. طرف چپ در صورتی بـا (۱۱–۳) مطابقت می‌کندکه اگر و فقط اگر $\hat{\boldsymbol{\alpha}}$ و $\hat{\beta}$ با $\hat{\mathbf{p}}$ و $\mathbf{r}$ جابه‌جاپذیرباشند وروابط زیر نیز برقرار باشند

$$[\hat{\alpha}_i, \hat{\alpha}_j]_+ = 2\delta_{ij}\hat{1}, \qquad [\hat{\alpha}_i, \hat{\beta}]_+ = 0, \qquad \text{و} \qquad \hat{\beta}^2 = \hat{1} \qquad (۱۷-۱۱)$$

این روابط جابه‌جائی تضمین می‌کنند که جملات ضربدری ناشی از "مجذورکردن" طرف چپ (۱۱ – ۱۶)حذف شوند.

ویژگیهای روابط جابه‌جائی عملگرهای $\hat{\boldsymbol{\alpha}}$ و $\hat{\beta}$ کاملا"شبیه‌به‌روابط جابه‌جائی‌ماتریسهای پاولی هستند. این شباهت پیشنهاد می‌کند که ماتریسهای ۴×۴ زیر را بسازیم

$$\hat{\alpha}_i = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_i \\ \hat{\sigma}_i & 0 \end{pmatrix} \qquad \text{و} \qquad \hat{\beta} = \begin{pmatrix} \hat{1} & 0 \\ 0 & -\hat{1} \end{pmatrix} \qquad (۱۸-۱۱)$$

که در آن $\hat{\sigma}_i$ ها ماتریسهائی هستند ۲×۲که به‌وسیله (۶–۷)داده‌شده‌اند. معادلات(۱۱–۱۸) مخفف ماتریسهای زیراند

$$\hat{\alpha}_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{\alpha}_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{\alpha}_z = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{\beta} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad (۱۹-۱۱)$$

جایگذاری مستقیم محقق می‌دارد که این ماتریسها واقعاً" در روابط جابه‌جائی (۱۱–۱۷) صدق می‌کنند*. بنابراین معادله دیراک (۱۱–۱۵) می‌تواند به‌عنوان یک معادله دیفرانسیل ماتریسی ۴×۴ برای تابع حالت چهار مولفه‌ای (اسپینور)

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi^{(1)} \\ \Psi^{(2)} \\ \Psi^{(3)} \\ \Psi^{(4)} \end{pmatrix} \qquad (۱۱ - ۲۰)$$

درنظرگرفته شود. یا به‌طور معادل، این معادله می‌تواند به‌عنوان مجموعه‌ای از چهارمعادله دیفرانسیل جفت شده برای مولفه‌های Ψ در نظر گرفته شود.

ویژه حالتهای مانای انرژی با در نظر گرفتن

$$\Psi = e^{-i\varepsilon_i t/\hbar}\psi_i(\mathbf{r})$$

به‌دست می‌آیند که وقتی در (۱۱–۱۵) قرار داده شود معادله ویژه مقداری انرژی دیراک را به‌صورت زیر به‌دست می‌دهد

$$\left\{c\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c}\mathbf{A}\right) + q\Phi + \hat{\beta}mc^2\right\}\psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i\psi_i(\mathbf{r}) \qquad (۱۱ - ۲۱)$$

فرض می‌کنیم که $\mathbf{A}$ و Φ معرف میدانهای *ایستا* هستند.

۳– ذرات آزاد دیراک

معادله (ویژه مقداری انرژی) دیراک برای یک ذره آزاد $(\mathbf{A} = \Phi = 0)$ عبارت است از

$$\left\{c\frac{\hbar}{i}\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\nabla + \hat{\beta}mc^2\right\}\psi_{\mathbf{p}} = \varepsilon_{\mathbf{p}}\psi_{\mathbf{p}} \qquad (۱۱ - ۲۲)$$

درمقایسه با مورد غیرنسبیتی، فرض می‌کنیم که جواب، یک ویژه تابع تکانه به‌شکل زیر است

$$\psi_{\mathbf{p}} = |u_{\mathbf{p}}\rangle e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \qquad (۱۱ - ۲۳)$$

---

* این نمایش بخصوص برای $\hat{\alpha}$ و $\hat{\beta}$، هرچند یکتا نیست، ولی اغلب مورداستفاده قرار می‌گیرد.

که دامنه آن اسپینور چهار مولفه‌ای

$$|u_{\mathbf{p}}\rangle = \begin{pmatrix} u_{\mathbf{p}}^{(1)} \\ u_{\mathbf{p}}^{(2)} \\ u_{\mathbf{p}}^{(3)} \\ u_{\mathbf{p}}^{(4)} \end{pmatrix}$$

است . با قراردادن (۱۱–۲۳) در (۱۱–۲۲) معادله ویژه مقداری ماتریسی ۴×۴

$$\{c\mathbf{p}\cdot\hat{\boldsymbol{\alpha}} + \hat{\beta}mc^2\}|u_{\mathbf{p}}\rangle = \varepsilon_{\mathbf{p}}|u_{\mathbf{p}}\rangle \qquad (۱۱-۲۴)$$

به‌دست می‌آید .نشان دادن اینکه ویژه مقدارهای (۱۱–۲۴) عبارتنداز

$$\varepsilon_{\mathbf{p}}{}^{+} = (c^2p^2 + m^2c^4)^{1/2} \quad \text{و} \quad \varepsilon_{\mathbf{p}}{}^{-} = -(c^2p^2 + m^2c^4)^{1/2} \qquad (۱۱-۲۵)$$

به‌عنوان یک تمرین واگذارمی‌شود (رک مسئله ۱۱–۳) .در زیرنشان خواهیم دادکه حالتهای انرژی منفی‌نباید به‌عنوان‌زاید و نامربوط‌کنار گذاشته شوند . نتیجه می‌شود که ویژه‌بردارها برای انرژی مثبت عبارتنداز

$$|u_{\mathbf{p}\uparrow}^{+}\rangle = N_p\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \dfrac{cp_z}{\varepsilon_p{}^{+} + mc^2} \\ \dfrac{c(p_x + ip_y)}{\varepsilon_p{}^{+} + mc^2} \end{pmatrix} \quad \text{و} \quad |u_{\mathbf{p}\downarrow}^{+}\rangle = N_p\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \dfrac{c(p_x - ip_y)}{\varepsilon_p{}^{+} + mc^2} \\ \dfrac{-cp_z}{\varepsilon_p{}^{+} + mc^2} \end{pmatrix} \qquad (۱۱-۲۶\ \text{الف})$$

که در آن N_p یک ثابت بهنجارش است . "پیکانها " برای تمایز بین دوحالت انرژی مثبت به‌کار می‌روند و ،همان‌طور که خواهیم دید ، جهت اسپین (بالا یا پائین) ذره دیراک‌رانشان می‌دهند . حالتهای انرژی منفی دارای دامنه‌هائی به‌صورت زیراند

$$|u_{\mathbf{p}\uparrow}^{-}\rangle = N_p\begin{pmatrix} \dfrac{-cp_z}{-\varepsilon_p{}^{-} + mc^2} \\ \dfrac{-c(p_x + ip_y)}{-\varepsilon_p{}^{-} + mc^2} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{و} \quad |u_{\mathbf{p}\downarrow}^{-}\rangle = N_p\begin{pmatrix} \dfrac{-c(p_x - ip_y)}{-\varepsilon_p{}^{-} + mc^2} \\ \dfrac{cp_z}{-\varepsilon_p{}^{-} + mc^2} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad (۱۱-۲۶\ \text{ب})$$

هر چهار اسپینور فوق می‌توانند بر طبق $\langle u_{\mathbf{p}}|u_{\mathbf{p}}\rangle = 1$ ، با قراردادن

$$N_p = \left[\frac{\varepsilon_p{}^{+} + mc^2}{2\varepsilon_p{}^{+}}\right]^{+1/2}$$

بهنجار شوند . حالت کل به‌وسیله تکانه آن ، $\mathbf{p}$ ، اسپین (بالا یا پائین) آن ، و نوع انرژی (مثبت یا منفی) آن ، مشخص می‌شود . به‌عنوان مثال ، یک ذره که در امتداد محور z با انرژی منفی و اسپین بالا حرکت می‌کند ، به‌وسیلهٔ

$$\psi_{\mathbf{p}\uparrow}^{-} = |u_{\mathbf{p}\uparrow}^{-}\rangle\, e^{ip_z z/\hbar} = N_p \begin{pmatrix} \dfrac{-cp_z}{-\varepsilon_p{}^{-} + mc^2} \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{ip_z z/\hbar}$$

با انرژی

$$\varepsilon_{\mathbf{p}} = \varepsilon_{\mathbf{p}}{}^{-} = -(p_z{}^2c^2 + m^2c^4)^{1/2}$$

نشان داده می‌شود .

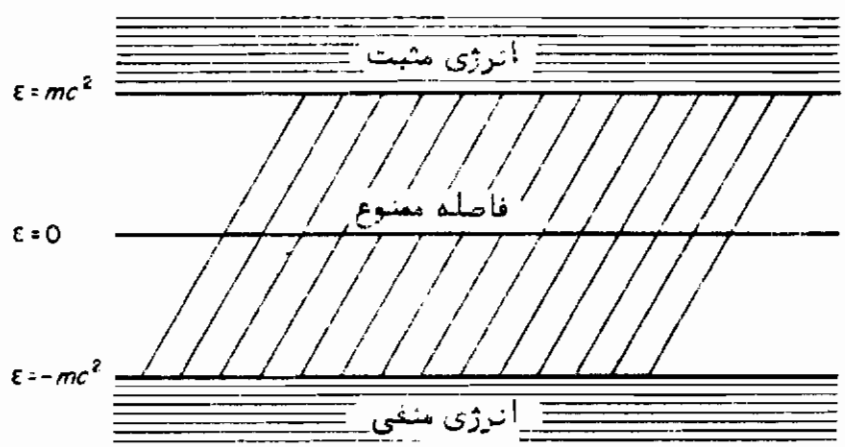
اثبات اینکه برای حالتهای انرژی مثبت ، دو مولفه پائین (۱۱ــ۲۶ الف) نسبت به‌دو مولفه بالائی از مرتبه v/c هستند به‌عنوان یک تمرین واگذار می‌شود (رک مسئله ۱۱ــ۵) . بنابراین ، در حد غیرنسبیتی ، مولفه‌های پائین کوچک‌اند و می‌توانند نادیده گرفته شوند . وقتی $v/c \to 0$ ، ویژه تابعهای انرژی مثبت متناظر با حالتهای غیرنسبیتی ذره‌اند ، وبنابر این ویژگیهای این حالتها به‌وسیله دو مولفه بالائی (۱۱ــ۲۶ الف) تعیین می‌شوند. در حد غیرنسبیتی ، تابع حالتهای نسبیتی (۱۱ــ۲۶ الف) به‌اسپینورهای مولفه‌ای $\psi_{\mathbf{p}\uparrow} = \binom{1}{0} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}$ و $\psi_{\mathbf{p}\downarrow} = \binom{0}{1} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}$ تقلیل می‌یابند که به‌ترتیب معرف یک ذره آزاد با اسپین $\frac{1}{2}$ در جهت "بالا" و در جهت "پائین" می‌باشند .

۴ــ حالتهای انرژی منفی

همان‌طور که در بالا ذکرشد ، حالتهای انرژی منفی نمی‌توانند به‌عنوان جوابهای نامربوط کنار گذاشته شوند ؛ در زیر نشان می‌دهیم که این حالتها معنی فیزیکی دارند. طیف ذره آزاد پیوسته است و از $+\infty$ تا $-\infty$ ، به‌جز برای یک فاصلهٔ ممنوع ، $-mc^2 < \varepsilon < mc^2$

گسترده است . (شکل ۱۱–۱) .

دیراک پیشنهاد کرد که در طبیعت بینهایت الکترون ــ بیش از آنچه که برای پرکردن حالتهای انرژی منفی لازم باشد ــ وجود دارد . اصل پاولی جمعیت هر حالت یک ذره آزاد را به‌یک الکترون محدود می‌کند . حالتهای انرژی منفی کاملا" پر فرض می‌شوند . این "دریای" بینهایت فرمی از الکترونهای با انرژی منفی یک چگالی بار یکنواختی در همه‌جای فضا ایجاد می‌کند . قانون گاوس ایجاب می‌کند که میدان در مرکز یک کره که به‌طور یکنواخت باردار شده است ، صفر باشد . چون شعاع این کره می‌تواند به‌سمت بینهایت میل کند ، و هر نقطه از فضا می‌تواند به‌عنوان مرکز کره در نظر گرفته شود ، به‌این نتیجه می‌رسیم که یک توزیع بار با چگالی یکنواخت در یک گستره نامحدود هیچ میدان قابل مشاهده‌ای ایجاد نمی‌کند . حالتی که در آن دقیقا" آنقدر الکترون وجود دارد که ترازهای منفی را پر کنند حالت خلاء نامیده می‌شود . هرذره اضافی باید در حالتهای انرژی مثبت قرار گیرد و به‌عنوان الکترون مشاهده می‌شود .



شکل (۱۱–۱) دیاگرام تراز انرژی برای ذرات آزاد دیراک .

از حالت خلاء شروع می‌کنیم . با جذب یک فوتون باید برانگیختن یک الکترون با انرژی منفی به‌تراز مثبت امکان‌پذیر باشد . جای خالی یا "حفره" به‌جای مانده این الکترون یکنواختی دریای فرمی را از بین می‌برد . میدان ایجاد شده به‌وسیله این حفره معادل با میدانی است که یک ذره با بار مخالف بار الکترون ایجاد می‌کند . این حفره به‌صورت یک الکترون مثبت ــ یک پوزیترون ــ که پاد ذره الکترون است مشاهده می‌شود . فرایندی که در آن یک فوتون جذب می‌شود و یک جفت الکترون ــ پوزیترون از خلاء به‌وجود می‌آید "آفرینش جفت" نامیده می‌شود . کمترین انرژی لازم فوتون عبارت است از

$$mc^2 - (-mc^2) = 2mc^2 = \hbar\omega \simeq 1 \quad \text{MeV}$$

فوتونی با این انرژی متناظر با یک کوانتای اشعه γ است . اثبات اینکه ممکن نیست وقتی‌یک فوتون اشعه γ از بین می‌رود و یک جفت الکترون ــ پوزیترون به‌وجود می‌آید هم تکانه و هم انرژی هردو پایسته باشند ، به‌عنوان تمرین به‌خواننده واگذار می‌شود . چون هم تکانه و هم انرژی ،هردو ،باید پایسته باشند ، این فرایند تنها در حضور یک میدان خارجی مثل‌میدان یک هسته اتمی ، که مقداری از تکانه را جذب می‌کند ، رخ می‌دهد . فرایند معکوس (نابودی جفت) وقتی رخ می‌دهد که الکترون بازگشت کند و حفره را پر نماید ، و بدین وسیله یک جفت فوتون اشعه γ آزاد می‌کند . چون دوفوتون دراین فرایندگسیل می‌شود ،انرژی و تکانه می‌توانند به‌طور همزمان ، بدون نیاز به‌هیچ جرم اضافی مثل هسته ، پایسته بمانند . توجه کنیم‌که این تعبیر حالتهای انرژی منفی نمی‌تواند به‌ذرات کلاین ــ گوردون اعمال شود زیرا آنها بوزونهائی هستند که از اصل طرد پاولی پیروی نمی‌کنند .

۵ ــ یک ذره دیراک در یک میدان ایستا

معادله ویژه‌مقداری انرژی دیراک (۱۱ــ۱۲) برای یک ذره در یک میدان الکتریکی ایستا (الکتروستاتیک) $(\mathbf{E} = -\nabla\Phi)$ و یک میدان مغناطیسی ایستا (ماگنتوستاتیک) $(\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A})$ عبارت است از

$$\left\{c\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c}\mathbf{A}\right)\cdot\hat{\boldsymbol{\alpha}} + \hat{\beta}mc^2 + q\Phi\right\}\psi_i = \varepsilon_i\psi_i \qquad (۲۷-۱۱)$$

که در آن

$$\psi_i = \begin{pmatrix}\psi_i^{(1)}\\ \psi_i^{(2)}\\ \psi_i^{(3)}\\ \psi_i^{(4)}\end{pmatrix}$$

معادله (۱۱ــ۲۷) معادل است با دو معادله جفت شدهٔ

$$\left\{c\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c}\mathbf{A}\right)\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\right\}\psi_i^{(\mathrm{B})} + (mc^2 + q\Phi)\psi_i^{(\mathrm{A})} = \varepsilon_i\psi_i^{(\mathrm{A})}$$

$$(۲۸-۱۱)$$

$$\left\{c\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c}\mathbf{A}\right)\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\right\}\psi_i^{(\mathrm{A})} - (mc^2 - q\Phi)\psi_i^{(\mathrm{B})} = \varepsilon_i\psi_i^{(\mathrm{B})}$$

که در آنها

$$\psi_i^{(A)} = \begin{pmatrix} \psi_i^{(1)} \\ \psi_i^{(2)} \end{pmatrix} \qquad \text{و} \qquad \psi_i^{(B)} = \begin{pmatrix} \psi_i^{(3)} \\ \psi_i^{(4)} \end{pmatrix}$$

مولفه‌های بالائی وپائینی ویژه‌تابع چهارمولفه‌ای دیراک هستند . برای تفکیک این معادلات نخست دومی را حل می‌کنیم و نتیجه می‌گیریم

$$\psi_i^{(B)} = \left\{\frac{c(\hat{\mathbf{p}} - (q/c)\,\mathbf{A}) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}}{\varepsilon_i - q\Phi + mc^2}\right\}\psi_i^{(A)} \qquad (۲۹-۱۱)$$

با قرار دادن این نتیجه در معادله اول خواهیم داشت

$$c^2\left\{\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c}\mathbf{A}\right) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}(\varepsilon_i - q\Phi + mc^2)^{-1}\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c}\mathbf{A}\right) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}\right\}\psi_i^{(A)} + (mc^2 + q\Phi)\psi_i^{(A)} = \varepsilon_i\psi_i^{(A)}. \qquad (۳۰-۱۱)$$

درحد غیرنسبیتی ، $\psi^{(B)}$ در مقابل $\psi^{(A)}$ قابل صرفنظرکردن است ؛ در حد $v/c \to 0$ ، رفتار این ذره کلا" بوسیله (۱۱-۳۰) تعیین می‌شود . به‌علاوه ، در حد غیرنسبیتی ، انرژی غیر نسبیتی کل $\varepsilon_i' = \varepsilon_i - mc^2$ و انرژی پتانسیل $q\Phi$ خیلی کوچکتر ازانرژی سکون هستند.می‌توان بسط زیر را انجام داد

$$(\varepsilon_i - q\Phi + mc^2)^{-1} = (\varepsilon_i' - q\Phi + 2mc^2)^{-1} \simeq \frac{1}{2mc^2}\left[1 - \frac{\varepsilon_i' - q\Phi}{2mc^2} + \cdots\right] \qquad (۳۱-۱۱)$$

در حد نهائی غیرنسبیتی ،فقط جمله‌اول طرف راست (۱۱-۳۱) را نگه می‌داریم و (۱۱-۳۰) می‌شود

$$\left\{\frac{[(\hat{\mathbf{p}} - (q/c)\,\mathbf{A}) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}]^2}{2m} + q\Phi\right\}\psi_i^{(A)} = \varepsilon_i'\psi_i^{(A)} \qquad (۳۲-۱۱)$$

برای نشان‌دادن اینکه چگونه اسپین به‌صورت یک نتیجه طبیعی معادله دیراک در حد غیر-نسبیتی حاصل می‌شود ، (۱۱-۳۱) را با وارد کردن اتحادهای عملگری زیر ساده می‌کنیم*

---

* توجه کنید که حاصلضرب برداری دو عملگر یکسان در (ب) صفر نیست . این بدان علت است که مؤلفه‌های $\hat{\mathbf{p}}$ و $\mathbf{A}$ جابجاپذیر نیستند .

(الف)

$$(\hat{\sigma}\cdot\hat{\mathbf{U}})(\hat{\sigma}\cdot\hat{\mathbf{V}}) = \hat{\mathbf{U}}\cdot\hat{\mathbf{V}} + i\hat{\sigma}\cdot(\hat{\mathbf{U}}\times\hat{\mathbf{V}})$$
$$[\hat{\sigma},\hat{\mathbf{U}}] = [\hat{\sigma},\hat{\mathbf{V}}] = 0 \qquad (۱۱-۳۳ \text{ الف})$$

و (ب)

$$\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c}\mathbf{A}\right)\times\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c}\mathbf{A}\right) = \frac{iq\hbar}{c}\nabla\times\mathbf{A} = \frac{iq\hbar}{c}\mathbf{B} \qquad \left(\hat{\mathbf{p}} = \frac{\hbar}{i}\nabla\right)$$
$$(۱۱-۳۳ \text{ ب})$$

با قراردادن $\hat{\mathbf{U}} = \hat{\mathbf{V}} = \hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c}\mathbf{A}$ ، (۱۱-۳۲) خواهد شد

$$\left\{\frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c}\mathbf{A}\right)^2 - \frac{q}{mc}\mathbf{S}\cdot\mathbf{B} + q\Phi\right\}\psi_i^{(\mathbf{A})} = \varepsilon_i'\psi_i^{(\mathbf{A})} \qquad (۱۱-۳۴)$$

که در آن $\hat{\mathbf{S}} = \frac{1}{2}\hbar\hat{\sigma}$.

معادله (۱۱-۳۴) با معادله ویژه‌مقداری انرژی غیرنسبیتی شرودینگر با تعمیم پاولی ، یکسان است . جمله اول هامیلتونی طرف چپ (۱۱-۳۴) شامل انرژی جنبشی و برهم‌کنش مداری با میدان $\mathbf{B}$ است . جملات دوم و سوم به‌ترتیب برهم‌کنشهای اسپین ـ مغناطیسی و الکتروستاتیکی هستند .

بنابراین ، در حد غیرنسبیتی ، یک ذره دیراک دارای ویژگیهای اسپین ـ مغناطیسی است . قابل توجه است که این جنبه ، که از ملاحظات نسبیتی نشأت گرفته است ، در حد $v/c \to 0$ محفوظ می‌ماند . همچنین توجه کنیم که گشتاور دوقطبی اسپینی در (۱۱-۳۴) به‌طور صحیحی به‌صورت

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_s = \frac{g_s q\hat{\mathbf{S}}}{2mc} = \frac{q\hat{\mathbf{S}}}{mc}$$

داده می‌شود ، در این رابطه ضریب ژیرومغناطیسی برابر است با $g = ۲$ ، مقداری که به‌طور تجربی برای الکترون مشاهده شده است .

جالب توجه است که تصحیحات نسبیتی مهم در (۱۱-۳۰) را در موردی که $\mathbf{A} = 0$ است و $q\Phi = V(r)$ یک پتانسیل نیروی مرکزی‌است ،درنظربگیریم . این وضعیت ،وقتی قرار دهیم $V = -e^2/r$ ، متناظر با یک الکترون هیدرژنی است . با بردن (۱۱-۳۱)در (۱۱-۳۰) ، نتیجه می‌گیریم

$$\left\{\left[\frac{\hat{\mathbf{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}(1-[\varepsilon_i'-V(r)]/2mc^2)\hat{\mathbf{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}}{2m}\right]+V(r)\right\}\psi_i^{(A)}=\varepsilon_i'\psi_i^{(A)} \quad (۳۵-۱۱)$$

در این مورد $T=\varepsilon_i'-V(r)=\hat{p}^2/2m$ انرژی جنبشی‌غیرنسبیتی ذره‌است . با استفاده‌از اتحادهای (۱۱–۳۳) و خواص عملگرهای $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ و $\hat{\mathbf{p}}=(\hbar/i)\nabla$ اتحاد زیر می‌تواند بر قرار گردد

$$\frac{1}{2m}(\hat{\mathbf{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}})\left[1-\frac{(\varepsilon_i'-V)}{2mc^2}\right](\hat{\mathbf{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}})$$
$$=\frac{\hat{p}^2}{2m}-\frac{\hat{p}^4}{8m^3c^2}-\frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\nabla V\cdot\nabla+\frac{\hbar}{4m^2c^2}\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\nabla V\times\hat{\mathbf{p}} \quad (۳۶-۱۱)$$

با استفاده از این رابطه و توجه به‌اینکه برای میدانهای مرکزی داریم

$$\nabla V=\frac{dV}{dr}\frac{\mathbf{r}}{r}$$

(۱۱ – ۳۵) ، بعداز جمع و جورکردن جملات ، می‌شود

$$\left\{\left(\frac{\hat{p}^2}{2m}+V\right)-\frac{\hat{p}^4}{8m^3c^2}+\frac{\hbar}{4m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot(\mathbf{r}\times\hat{\mathbf{p}})-\frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\frac{dV}{dr}\frac{\partial}{\partial r}\right\}\psi_i^{(A)}$$
$$=\varepsilon_i'\psi_i^{(A)} \quad (۳۷-۱۱)$$

دوجمله اول طرف چپ نمایشگرها میلتونی غیرنسبیتی هستند ،جمله سوم جمله مربوط به‌تغییر جرم است که تصحیحات نسبیتی برجسته انرژی جنبشی را تأمین می‌کند . جمله چهارم می‌تواند به‌صورت

$$\Delta E|(\text{اسپین – مدار})=\frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\hat{\mathbf{S}}\cdot\hat{\mathbf{L}}$$

یا در مورد هیدرژن به‌صورت

$$\Delta E\ (\text{اسپین – مدار})=\frac{1}{2m^2c^2}\frac{e^2}{r^3}\hat{\mathbf{S}}\cdot\hat{\mathbf{L}}$$

نوشته شود . این جمله مانند جمله به‌دست‌آمده در (۶ــ۳۵) جمله برهم‌کنش اسپین ــ مدار نامیده می‌شود ، و در آن ضریب تقدیمی توماس $\frac{1}{2}$ به‌طور طبیعی ظاهر شده است .

جمله پنجم جمله داروین است که اشاره به‌بحثمان از ساختار ریز در فصل ۷ دارد . در هیدرژن ، جمله داروین تصحیحات مرتبه اول انرژی را فقط در حالتهای s $(l = 0)$ ایجاد می‌کند . این تصحیحات به‌وسیله

$$\Delta E(\text{داروین}) \propto \langle n, l \left| \frac{dV}{dr} \frac{\partial}{\partial r} \right| n, l \rangle \to \int_0^\infty R_{nl} \frac{dV}{dr} \frac{dR_{nl}}{dr} r^2 \, dr$$

داده می‌شوند . برای هیدرژن $(V = -e^2/r)$ این رابطه خواهد شد

$$\Delta E(\text{داروین}) \propto e^2 \int_0^\infty R_{nl} \frac{1}{r^2} \frac{dR_{nl}}{dr} r^2 \, dr$$

$$= e^2 \int_0^\infty R_{nl} \, dR_{nl} = \tfrac{1}{2} e^2 \left| R_{nl}^2 \right|_0^\infty$$

یادآوری کنیم که R_{nl} در بینهایت ، برای تمام حالتهای مقید ، صفر می‌شود . چون این‌تابع در مبداء نیز برای تمام حالتها به‌استثنای حالتهای s صفر می‌شود ، تصحیحات انرژی فقط برای این حالتها وجود دارد .

بنابراین اثرات ساختار ریز در هیدرژن آثارنسبیتی مرتبه اول معادله دیراک هستند . در نتیجه می‌توانیم یک ذره دیراک را یک الکترون نسبیتی بدانیم .

۶ــ ذره دیراک در یک پتانسیل کولنی ــ ساختار ریز در هیدرژن

می‌توان انرژی ساختار ریز الکترون هیدرژنی را با اعمال نظریه پریشیدگی مرتبه اول به‌سه‌جمله ساختار ریز در (۱۱ــ۳۷) ، محاسبه کرد . اما در مورد خاص یک پتانسیل کولنی حل دقیق معادله دیراک امکان‌پذیر است . ویژه مقدارهای دقیق انرژی می‌توانند برحسب توانهای ثابت ساختار ریزبیان شوند ،و جملات عمده نگه داشته شوند . چون این‌روش‌بسیار پیچیده است ، ما فقط خلاصه مراحل کار را بیان می‌کنیم و نتایج را فهرست می‌کنیم .

معادله دیراک (۱۱ــ۲۷) برای پتانسیل کولنی عبارت است از

$$\left\{ c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta mc^2 - \frac{e^2}{r} \right\} \psi_i = \varepsilon_i \psi_i \qquad (۱۱ - ۳۸)$$

گرچه به‌نظر می‌رسد که (۱۱–۳۸) معرف یک مسئله نیروی مرکزی است ، اما نمی‌توان با به‌کار بردن $R_{nl}(r)Y_{lm_l}(\theta, \phi)$ متغیرها را از هم تفکیک کرد ، زیرا خود معادله جفت‌شدگی اسپین–مدار را در بر دارد و $\hat{L}_z$ پایسته نیست . به‌طور معادل ، m_l یک عددکوانتومی "خوب "نیست. برای انجام یک تفکیک ، دو دسته جواب زیر را وارد می‌کنیم

$$\psi_{nlj*m_j} = \begin{pmatrix} u(r)\left[\dfrac{l \pm m_j + \frac{1}{2}}{2l+1}\right]^{1/2} Y_{l,m_j-\frac{1}{2}} \\ \mp u(r)\left[\dfrac{l \mp m_j + \frac{1}{2}}{2l+1}\right]^{1/2} Y_{l,m_j+\frac{1}{2}} \\ -iv(r)\left[\dfrac{(l \pm 1) \mp (m_j \mp \frac{1}{2})}{(2l+1) \pm 2}\right]^{1/2} Y_{l\pm 1,m_j-\frac{1}{2}} \\ \mp iv(r)\left[\dfrac{(l \pm 1) \pm (m_j \pm \frac{1}{2})}{(2l+1) \pm 2}\right]^{1/2} Y_{l\pm 1,m_j+\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \qquad (۳۹-۱۱)$$

که در آن $j^{\pm} = l \pm \frac{1}{2}$ و $|m_j| \leqslant j$. با بیان (۱۱–۳۸) در مختصات کروی و قراردادن (۱۱–۳۹) در آن ، به‌معادلات زیر برای قسمتهای شعاعی $u(r)$ و $v(r)$ هدایت می‌شویم

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar c}\left\{\varepsilon_l + \frac{e^2}{r} + mc^2\right\} v &= \frac{du}{dr} + \frac{(1+k)u}{r} \\ \frac{1}{\hbar c}\left\{\varepsilon_l + \frac{e^2}{r} - mc^2\right\} u &= -\frac{dv}{dr} - \frac{(1-k)v}{r} \end{aligned} \qquad (۴۰-۱۱)$$

که در آنها

$$k = -(l+1) \quad (\text{برای } \psi_{j+})$$
$$k = l \quad (\text{برای } \psi_{j-})$$

این معادلات به‌روشی مشابه با روش به‌کار برده شده در معادلات شعاعی غیرنسبیتی مورد بررسی قرار می‌گیرند . شرایط حالت مقید* روی u و v در صورتی می‌توانند برقرار شوند که

---

* برای جزئیات به‌یکی از دو مرجع زیر مراجعه کنید

L.I.Schiff, "Quantum Mechanics." 3rd ed. P.485, Mc Graw-Hill, New York,1968.

H.A.Bethe and E.E.salpeter,"Quantum Mechanics of one and two Electron Atomes," P. 65, Springer- verlag, Berlin, 1957.

اگر و تنها اگر ε_i به‌مقادیر زیر محدود شود

$$\varepsilon_i = \varepsilon_{n'k} = mc^2\left\{1 + \frac{\gamma^2}{[(k^2-\gamma^2)^{1/2}+n']^2}\right\}^{-1/2}, \qquad \left(\gamma = \frac{e^2}{\hbar c}\right) \quad (۴۱-۱۱)$$

که در آن $n' = 0, 1, 2, \ldots$. این نتیجه دقیق است و انرژیهای کوانتیده یک الکترون نسبیتی هیدرژنی را به‌دست می‌دهد . چون $\gamma^2 \simeq (\frac{1}{137})^2 \simeq 10^{-4}$ ، می‌توانیم (۱۱–۴۱) را برحسب توانهای γ^2 بسط دهیم . جملات عمده عبارتنداز

$$\varepsilon_i \simeq mc^2\left[1 - \frac{\gamma^2}{2n^2} - \frac{\gamma^4}{2n^4}\left(\frac{n}{|k|} - \frac{3}{4}\right) + \cdots\right] \quad (۴۲-۱۱)$$

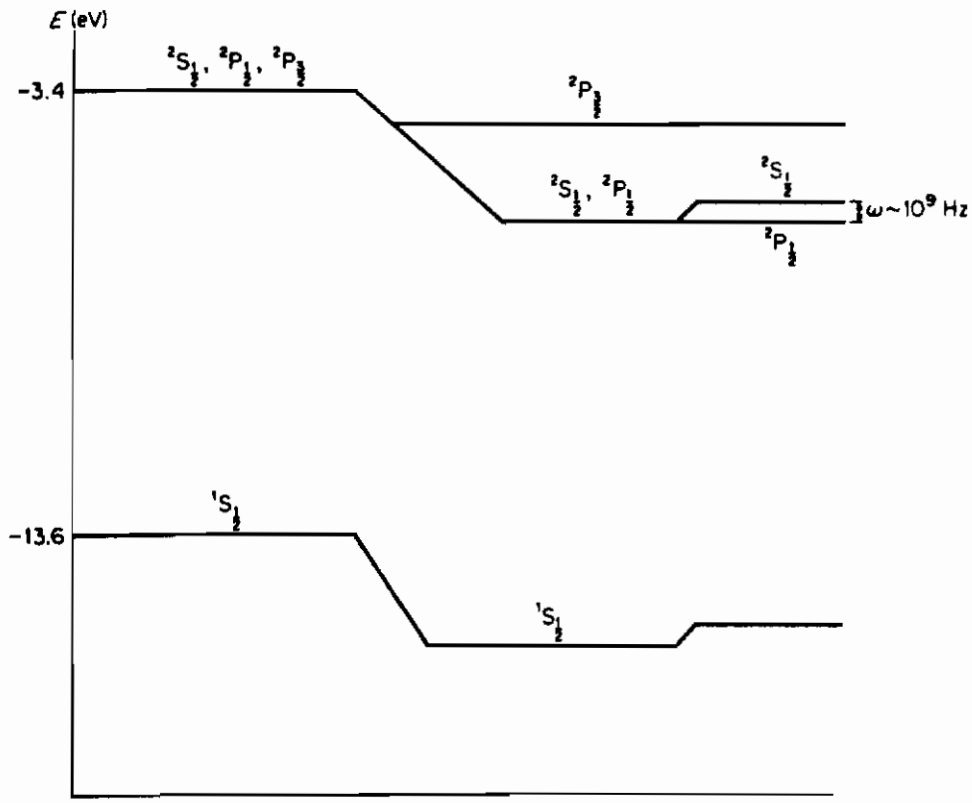
که‌درآن $n = n' + |k| = 1, 2, 3, \ldots$. به‌خاطرداریم‌که $|k| = l + 1$ برای $j = l + \frac{1}{2}$ و $|k| = l$ برای $j = l - \frac{1}{2}$ ، در نتیجه برای هرکدام ازاین‌دومورد داریم $|k| = j + \frac{1}{2}$ به‌طوری که (۱۱–۴۲) می‌تواند به‌صورت زیر بیان شود

$$\begin{aligned}\varepsilon_{n,j} &= mc^2 - \frac{me^4}{2\hbar^2 n^2} - \frac{\gamma^2 me^4}{2\hbar^2 n^3}\left(\frac{1}{j+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4n}\right)\\ &= mc^2 + \varepsilon_n + \frac{\gamma^2\varepsilon_n}{n}\left(\frac{1}{j+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4n}\right)\end{aligned} \quad (۴۳-۱۱)$$

این جملات به‌ترتیب عبارتنداز انرژی سکون ، انرژی "بوهر" و انرژی ساختار ریز ، که در (۷–۵۱) داده شده‌اند . جمله آخر با داده‌های طیف نمائی مشاهده شده در هیدرژن مطابقت می‌کند .

جملات ساختار ریز در هیدرژن آن‌طور که توسط (۱۱–۴۳) داده شده‌اند تصحیحاتی به‌دست می‌دهند که‌نسبت به‌ترازهای الکتروستاتیکی بوهر از مرتبه 10^{-4} هستند . عوامل اضافی دیگری وجود دارندکه تصحیحاتی خیلی کوچکتراز تصحیحات ناشی از ساختار ریز به‌وجود می‌آورند . به‌عنوان مثال ، پروتون ، که دارای گشتاور دوقطبی مغناطیسی اسپینی مخصوص به‌خود است ، می‌تواند با دوقطبی وابسته به‌اسپین الکترونی برهم‌کنش کند . این برهم‌کنشها ساختار فوق ریز را در طیف هیدرژن به‌وجود می‌آورند . هم‌چنین ، الکترون هیدرژنی فقط در خارج پروتون تحت تاثیر یک پتانسیل کولنی قرار می‌گیرد . در داخل پروتون ($r < 10^{-13}$ cm)، پتانسیل قطعا" به‌صورت $1/r$ نیست . این انحراف یک جابه‌جائی خیلی‌کوچکی در طیف انرژی هیدرژنی ایجاد می‌کند . سومین عامل مهم مربوط به‌برهم‌کنش

بین یک الکترون و تابش در خلاء است . در غیاب تابش خارجی ، مقادیر متوسط **E** و **B** ، همان‌طورکه انتظار می‌رود ، صفراند . اما ، افت وخیزهای غیرصفر یا عدم قطعیت‌های‌میدان کوانتیده هنوز با الکترون برهم‌کنش می‌کنند و یک ضریب اسپینی غیرعادی g ، یعنی ، $g_s \simeq 2.00232$ به‌وجود می‌آورند . این اثر که مسئول جابه‌جائی کوچک در طیف هیدرژنی است ، جابه‌جایی‌لمب[1] نامیده می‌شود و جدائی مختصری بین ترازهای $^2S_{\frac{1}{2}}$ و $^2P_{\frac{1}{2}}$ درهیدرژن ایجاد می‌کند (شکل ۱۱–۲) . افت و خیزهای میدان تابشی کوانتیده مسئول گذارهای خود به‌خود در غیاب میدانهای مشاهده‌پذیر **E** و **B** نیز هستند .



جابه‌جایی لمب + ساختار ریز + انرژی الکتروستاتیک

شکل (۱۱–۲) – سهم های ساختار ریز و جابجایی لمب در طیف انرژی هیدروژن . جدایی انرژیهای الکتروستاتیک ، ساختار ریز و جابه‌جایی لمب به‌نسبتهای ۱ ، 10^{-4} و 10^{-5} هستند .

کوانتش میدان الکترومغناطیسی نه‌تنها سازگاری با اصل عدم قطعیت هایزنبرگ را تامین می‌کند ، بلکه مفهوم فوتون به‌عنوان یک کوانتای میدان را نیز توجیه می‌کند .

---

1) Lamb

علاقه‌مندان به‌مسئله عمومی کوانتش را به‌فصل ۱۲ ارجاع می‌دهیم .

در حالی که به‌نظر می‌رسد معادله دیراک بر رفتار کوانتومی الکترون نسبیتی حاکم است ، جوابهای آن از نظر فیزیکی همیشه آشکار نیستند . از یک نظر مفهوم مکان و سرعت یک ذره دیراک تا اندازه‌ای مبهم باقی می‌ماند . در واقع ، یک تحلیل دقیق معادله دیراک نشان می‌دهد که یک ذره دیراک که در یک جهت معین حرکت می‌کند عملا" دوحرکت با هم انجام می‌دهد . حرکت اول یک انتقال مکان متوسط ذره در جهت حرکت کلاسیکی است . حرکت دوم یک حرکت نامنظم است ، که عبارت است از نوسان بسا فرکانس زیاد ($\omega \simeq 2mc^2/\hbar = 2 \times 10^{21}$ Hz) ذره حول مرکز متوسط آن . فرکانس نوسانی این حرکت "لرزشی" بسیاربسیار بالاتراز آن است‌که بتواند مستقیما" مشاهده شود . جمله "افت و خیز" داروین در انرژی ساختارریزمی‌تواند ، به‌طورفیزیکی ،برپایه‌حرکت "لرزشی" الکترون‌توضیح داده شود.*

---

* به‌عنوان مثال به‌کتاب زیر مراجعه کنید .

J.D. Bjorken and S.D. Drell,"Relativistic Quantum Mechanics," P.52, Mc Graw-Hill,New York, 1964.

مسائل

۱۱–۱ نشان دهیدکه روابط جابه‌جائی (۱۱–۱۷) تضمین می‌کنندکه معادلات دیراک وکلاین–گوردون با یکدیگر سازگارند .

۱۱–۲ نشان دهید که ماتریسهای دیراک (۱۱–۱۹) در (۱۱–۱۷) صدق می‌کنند .

۱۱–۳ معادله ویژه مقداری ماتریسی (۱۱–۲۴) را بنویسید و حل کنید . تحقیق کنیدکه‌ویژه بردارها و ویژه مقدارها دقیقاً" به‌وسیله (۱۱–۲۵) و (۱۱–۲۶) داده می‌شوند .

۱۱–۴ تحقیق کنید که ویژه اسپینورهای ذره آزاد در (۱۱–۲۶) بهنجار شده به‌یک هستند ، $\langle u|u\rangle = 1$.

۱۱–۵ نشان دهید که درحد غیرنسبیتی ،دومولفه‌پائینی (۱۱–۲۶الف) v/c برابرمولفه‌های بالائی هستند .

۱۱–۶ نشان دهید که واکنش $\gamma \to e^+ + e^-$ (آفرینش جفت) نمی‌تواند هم انرژی و هم‌تکانه را در خلاء پایسته نگه دارد .

۱۱–۷ اتحادهای داده شده در (۱۱–۳۳) و (۱۱–۳۶) را به‌دست آورید .

۱۱–۸ (الف) نشان دهید که اگر چگالی احتمال وابسته به‌اسپینور دیراک $\rho = \Psi^\dagger\Psi$ باشد، جریان احتمال به‌وسیله

$$\mathbf{J} = c\Psi^\dagger \boldsymbol{\alpha}\Psi$$

داده می‌شود (راهنمائی : معادله (۱۱–۱۵) را به‌شکل $\nabla\cdot\mathbf{J} + (\partial\rho/\partial t) = 0$ درآورید)

(ب) یک ذره آزاد دیراک با انرژی مثبت ، که در جهت مثبت محور z با تکانهٔ p حرکت می‌کند درنظربگیرید . با استفاده از تعریف $\mathbf{J}$ در بالا ، سرعت جریان احتمال را پیدا کنید . نتیجه را توضیح دهید .

۱۱–۹ با استفاده از نظریه پریشیدگی مرتبه اول ، جابه‌جائی انرژی حالت پایه هیدرژن‌را در صورتی که پروتون را به‌صورت کره‌ای با شعاع 10^{-13}cm که به‌طور یکنواخت بساردار شده است در نظر بگیریم ، محاسبه کنید .

مراجع پیشنهادی

Berestetskii, V. B., Lifshitz, E. M., and Pitaevskii, L. P., "Relativistic Quantum Theory." Addison-Wesley, Reading Massachusetts, 1971.

Bethe, H. A., and Salpeter, E. E., "Quantum Mechanics of One and Two Electron Atoms." Springer-Verlag, Berlin, 1957.

Bjorken, J. D., and Drell, S. D., "Relativistic Quantum Mechanics." McGraw-Hill, New York, 1964.

Messiah, A., "Quantum Mechanics," Volume II. Wiley, New York, 1962.

Schiff, L. I., "Quantum Mechanics," 3rd ed. McGraw-Hill, New York, 1968.

۱۲

نظریه میدان کوانتومی

یک میدان کلاسیکی از نظر ریاضی به‌وسیله یک تابع $\psi(\mathbf{r}, t)$ که حالت میدان را در نقطه $\mathbf{r}$ و زمان t مشخص می‌کند نشان داده می‌شود . به‌عنوان مثال ، ψ می‌تواند نمایانگر افت و خیز چگالی وابسته به‌یک موج صوتی در هوا یا تغییر مکان یک نقطه از یک تار مرتعش باشد . این میدانها اساساً" دانه‌ای هستند زیرا معرف حرکات ذرات می‌باشند .

نمایش میدانی اغلب اوقات مسئله چندجسمی را ساده می‌کند . به‌عنوان مثال ، امواج عرضی یک تار کشیده شده در معادله موج یک بعدی

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} - \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 y}{\partial t^2} = 0 \qquad (۱-۱۲)$$

صدق می‌کند که در آن $y(x, t)$ جابه‌جائی تار و $v = \left(\frac{\text{تنش}}{\text{چگالی‌خطی}}\right)^{\frac{1}{2}}$ سرعت فاز امواج در امتداد تار است . بررسی این یک معادله میدان از $۱۰^{۲۳} \sim$ معادله حرکت مولکولهای انفرادی تار ساده‌تر است . تقریب یک سیستم چندجسمی میکروسکوپیکی به‌وسیله یک‌میدان کلاسیکی وقتی که ویژگیهای ماکروسکوپیکی موردنظر باشند مفید است . از طرف دیگر میدان الکترومغناطیسی اساساً" یک میدان غیردانه‌ای است و از نظر دینامیکی معادل با یک مسئله چندجسمی شامل بینهایت ذره است .

معادله (۱۲-۱) اصولاً" یک فرمولبندی نیوتنی از دینامیک محیطهای پیوسته است . نظریه کوانتومی میدانها باید براساس یک صورتبندی لاگرانژی ـ هامیلتونی بندادی توسعه یابد . ما یک نظریه بندادی را با در نظرگرفتن گذار از یک زنجیر کشسان گسسته به یک‌تار

پیوسته هموار گسترش خواهیم داد .

۱ــ نظریه کلاسیکی میدانها

لاگرانژی وابسته به‌ارتعاشات عرضی یک زنجیرکشسان خطی N ــ ذره‌ای عبارت‌است‌از*

$$L = \sum_{i=1}^{N} \tfrac{1}{2} m \dot{y}_i^{\,2} - \sum_{i=1}^{N} \tfrac{1}{2} K (y_{i+1} - y_i)^2 \qquad (۲-۱۲)$$

که m جرم هر ذره ، K ثابت کشسانی هر فنر و y_i جابه‌جایی عرضی جرم‌نقطه‌ای i ام‌است. حرف a را برای نشان‌دادن فاصله دوجرم متوالی در حال تعادل (ثابت شبکه‌ای) بـه‌کـار خواهیم برد و در نتیجه Na طول کل زنجیر خواهد بود . گذار از زنجیر گسسته به‌پیوسته ، با برداشتن نیمی‌از هرجرم وانتقال آن به‌اندازه $a/2$ به‌سمت راست ، شروع می‌شود . با تکرار این عمل در بینهایت بار ، زنجیری با یک توزیع جرمی پیوسته ایجاد می‌کنیم . به‌علاوه در هر "نیمه‌سازی" ثابت شبکه ، ثابت کشسانی هر فنر دوبرابر می‌شود . بدین‌ترتیب ، به روابط ریاضی زیر هدایت می‌شویم

$$\lim_{a\to 0} \sum a \to \int dx$$

$$\lim_{a\to 0} \frac{m}{a} \to \frac{dm}{dx} = \mu = \text{چگالی جرمی خطی}$$

$$\lim_{\substack{a\to 0\\ K\to\infty}} Ka \to \tau = \text{کشش کشسانی}$$

شکل حدی لاگرانژی (۱۲ــ۲) عبارت است‌از

$$L = \lim_{a\to 0} \sum a \left\{ \frac{1}{2} \frac{m}{a} \dot{y}_i^{\,2} - \frac{1}{2} Ka \left(\frac{y_{i+1} - y_i}{a} \right)^2 \right\} \to \int dx \left\{ \frac{1}{2} \mu \dot{y}^2 - \frac{1}{2} \tau y'^2 \right\} \qquad (۳-۱۲)$$

که در آن $\dot{y} = \partial y/\partial t$ و $y' = \partial y/\partial x$. معادله (۱۲ــ۳) می‌تواند به‌صورت $L = \int \mathscr{L}(\dot{y}, y')\, dx$ نوشته می‌شود که $\mathscr{L}$ *چگالی لاگرانژی* (بر واحد طول) است وبرحسب چگالیهای انرژی‌جنبشی

---

* در این فصل L و H را به‌عنوان لاگرانژی و هامیلتونی به‌کارخواهیم‌برد و از $\mathscr{L}$ و $\mathscr{H}$ برای نمایش‌دادن چگالیهای آنها استفاده خواهیم کرد .

و انرژی پتانسیل به‌صورت $\mathscr{L} = \mathscr{T} - \mathscr{V}$ ، با $\mathscr{T} = \frac{1}{2}\mu\dot{y}^2$ و $\mathscr{V} = \frac{1}{2}\tau y'^2$ ، است .

چگالی لاگرانژی تابعی از سرعت میدان ، $\dot{y}(x, t)$ ، و مختصهٔ میدان ، $y(x, t)$ (و احتمالاً" مشتق آن y') است . باید تأکید کرد که x ، که نمایانگر نقطه‌ای است که در آن میدان در نظر گرفته شده است ، یک مختصه میدان نیست ، بلکه صرفاً" متغیری است که از شاخص پائینی i در (۱۲–۳) سرچشمه می‌گیرد . اکنون باید تعیین کنیم چگونه معادله حرکت برای میدان ، (۱۲–۱) ، از $\mathscr{L}$ به‌دست می‌آید . تعمیم به‌سه‌بعدی (۱۲–۳) با رفتن از تابع میدان $y(x, t)$ به $\psi(\mathbf{r}, t)$ حاصل می‌شود که ψ یک میدان نرده‌ای است . لاگرانژی این میدان دارای شکل عمومی زیر است

$$L = \int \mathscr{L}(\dot{\psi}, \psi, \nabla\psi)\, d\mathbf{r} = \int \mathscr{L}\left(\dot{\psi}, \psi, \frac{\partial\psi}{\partial x}, \frac{\partial\psi}{\partial y}, \frac{\partial\psi}{\partial z}\right) d\mathbf{r}$$

مشتق "تابعی" یا "وردشی" L نسبت به ψ را به‌صورت

$$\frac{\delta L}{\delta\psi} = \frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\psi} - \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial\mathscr{L}}{\partial(\partial\psi/\partial x_i)} \qquad (x_1 = x, \quad x_2 = y, \quad x_3 = z) \qquad (۱۲ - ۴)$$

تعریف می‌کنیم . به‌طور مشابه مشتق نسبت به‌سرعت میدان (۱۲–۴) ، $\delta L/\delta\dot{\psi}$ ، با جانشین کردن ψ به‌وسیله $\dot{\psi}$ به‌دست می‌آید . با استفاده از این تعریف مشتق ، بدون اثبات بیان می‌کنیم که معادله حرکت برای میدان می‌تواند از طرحواره آشنای* فصل ۲ به‌صورت

$$\frac{d}{dt}\frac{\delta L}{\delta\dot{\psi}} - \frac{\delta L}{\delta\psi} = 0 \qquad (۱۲ - ۵)$$

به‌دست آید . این معادلات ، معادلات لاگرانژی برای یک میدان هستند . با اعمال (۱۲–۵) به‌چگالی لاگرانژی تار ، (۱۲–۳) ، خواهیم داشت**

---

* مشتق نسبت به‌زمان به‌صورت زیر محاسبه می‌شود

$$\frac{d}{dt}\frac{\delta L}{\delta\dot{\psi}} = \frac{\partial}{\partial t}\left\{\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\dot{\psi}} - \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i}\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial(\partial\dot{\psi}/\partial x_i)}\right\}$$

** چون $\dot{y}'$ در $\mathscr{L}$ وارد نمی‌شود می‌توانیم قرار دهیم $\partial\mathscr{L}/\partial\dot{y}' = 0$

$$\frac{\delta L}{\delta y} = \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial y'} = \tau \frac{\partial^2 y}{\partial x^2}$$

$$\frac{d}{dt}\frac{\delta L}{\delta \dot{y}} = \frac{\partial}{\partial t}\left\{\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot{y}} - \frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot{y}'}\right\} = \mu \frac{\partial^2 y}{\partial t^2}$$

به‌طوری که از (۱۲ــ۵) نتیجه می‌شود

$$\mu \frac{\partial^2 y}{\partial t^2} - \tau \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = 0$$

که همان شکلی است که (۱۲ــ۱) ایجاب می‌کند .

برای یک میدان برداری $\boldsymbol{\psi}(\mathbf{r}, t)$ ، برای هر مولفه ψ_i ، به‌شرط اینکه این مولفه‌ها مستقل باشند ، یک معادله میدان به‌شکل (۱۲ــ۵) به‌دست می‌آوریم .

۲ــ چگالی هامیلتونی

هامیلتونی یک میدان می‌تواند برحسب چگالی آن به‌صورت $H = \int \mathscr{H}\, d\mathbf{r}$ بیان‌شود . چگالی $\mathscr{H}$ تابعی است از مختصات میدانی ، ψ_i ، و چگالی‌های تکانه مزدوج بندادی آنها که به‌صورت زیر تعریف شده‌اند

$$\pi_i = \frac{\delta L}{\delta \dot{\psi}_i} \qquad (۱۲ - ۶)$$

با انجام یک تبدیل لوژاندر ، شبیه به (۲ــ۵۹) ، خواهیم داشت

$$\mathscr{H} = \sum_{i=1}^{3} \dot{\psi}_i \pi_i - \mathscr{L} \qquad (۱۲ - ۷)$$

مسلم است که $\mathscr{H}$ باید به‌صورت تابعی از π_i ، ψ_i و $\nabla\psi_i$ بیان شود ولی نمی‌تواند شامل $\dot{\psi}_i$ باشد . با استفاده از تعریف (۱۲ــ۴) ، معادلات هامیلتون یک میدان به‌صورت

$$\frac{\delta H}{\delta \pi_j} = \dot{\psi}_j \qquad \text{و} \qquad \frac{\delta H}{\delta \psi_j} = -\dot{\pi}_j \qquad (۱۲ - ۸)$$

به‌دست می‌آیند . این معادلات هم‌ارز با معادلات لاگرانژی میدان می‌باشند .

به‌ویژه ، می‌توان نشان داد که چگالی هامیلتونی یک تار به‌شکل

$$\mathscr{H} = \frac{\pi_y{}^2}{2\mu} + \frac{\tau y'^2}{2} \qquad (۹-۱۲)$$

است . این تابع از لحاظ عددی با چگالی انرژی وابسته به‌تار مرتعش برابر است . از اعمال معادلات هامیلتون (۱۲–۸) به (۱۲–۹) نتیجه می‌شود

$$\dot{y} = \frac{\pi_y}{\mu} \qquad \text{و} \qquad \dot{\pi}_y = \tau y''$$

که پس از ترکیب با یکدیگر خواهند داد $\mu\ddot{y} - \tau y'' = 0$. این نتیجه ، همان‌طور که انتظار می‌رفت ، با (۱۲–۱) یکی است .

۳– کوانتش میدان

کوانتش یک میدان به‌این ترتیب انجام می‌گیرد که نخست متغیرهای بندادی میدان به‌وسیله عملگرهای هرمیتی

$$\pi_j \to \hat{\pi}_j \qquad \text{و} \qquad \psi_j \to \hat{\psi}_j$$

جایگزین می‌شوند و سپس روابط جابه‌جایی بین مختصات و تکانه‌های میدان ، با مشابهت با روابط وابسته به‌یک سیستم ذرات ، به‌صورت زیر وضع می‌شود

$$[\hat{\pi}_j(\mathbf{r}'), \hat{\pi}_k(\mathbf{r})] = [\hat{\psi}_j(\mathbf{r}'), \hat{\psi}_k(\mathbf{r})] = 0$$

$$[\hat{\psi}_j(\mathbf{r}'), \hat{\pi}_k(\mathbf{r})] = i\hbar\delta_{jk}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \qquad (۱۰-۱۲)$$

این روابط جابه‌جایی ایجاب می‌کنند که اندازه‌گیریهای همزمان دومختصه یا دو تکانه متفاوت میدان می‌توانند با دقت کامل در یک زمان انجام گیرند . از طرف دیگر ، اندازه‌گیریهای همزمان و دقیق $\hat{\psi}_j$ و $\hat{\pi}_j$ نمی‌توانند در یک نقطه از فضا انجام پذیرند . در بعضی موارد (به‌عنوان مثال ، میدانهای نسبیتی) اثرات تاخیری مهم‌اند . در این صورت روابط جابه‌جایی (۱۲–۱۰) باید به‌اندازه‌گیریهایی اشاره داشته باشند که در زمانهای متفاوت انجام می‌شوند . اما ، (۱۲–۱۰) به‌طور مناسبی راه عمومی کوانتش را روشن می‌کند .

هامیلتونی میدان به‌وسیله عملگر هرمیتی

$$\hat{H}_{\text{field}} = \int \mathscr{H}(\hat{\pi}_j, \hat{\psi}_j, \nabla\hat{\psi}_j)\, d\mathbf{r}$$

نشان داده می‌شود . ویژه حالتهای انرژی $\hat{H}_{\text{field}}$ حالتهای مانای میدان کوانتیده را تعیین می‌کنند . به‌طور معادل ، ویژه‌بردارها و ویژه مقدارهای معادله

$$\hat{H}_{\text{field}}|\text{field}\rangle = \varepsilon_{\text{field}}|\text{field}\rangle$$

را جستجو می‌کنیم . چون $\hat{H}$ یک مشاهده‌پذیر مناسبی برای میدان نیست ، این معادله‌ویژه مقداری نمی‌تواند در زبان دیفرانسیلی مکانیک موجی فرمولبندی شود .

۴ـ الکترودینامیک کلاسیکی

به‌طور مضحکی ، یکی از مشکل‌ترین میدانهای کلاسیکی برای کوانتش ، میدان وابسته به‌تابش الکترومغناطیسی است . چون میدان تابشی طبیعتا" نسبیتی است ، باید در اعمال روابط جابه‌جایی دقت کافی مبذول شود . همان‌طور که خواهیم دید ، مولفه‌های $\mathbf{E}$ و $\mathbf{B}$ ی وابسته به‌میدان الکترومغناطیسی مستقل نیستند . بنابراین قبل از اعمال کوانتش لازم است که آنها را به‌مختصات میدان مستقل تقلیل داد .

سیستمی از ذرات باردار را در حضور میدانهای الکترومغناطیسی در نظر بگیریم معادلات حرکت نیوتنی* ذرات به‌وسیله قانون نیروی لورنتس ، یعنی ،

$$m\frac{d^2\mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i = q\mathbf{E}_i + \frac{q}{c}\mathbf{v}_i \times \mathbf{B}_i \qquad (۱۱-۱۲)$$

داده می‌شوندکه در آن $\mathbf{E}_i$ و $\mathbf{B}_i$ میدانهای الکتریکی ومغناطیسی درمحل ذره i ام‌هستند . معادلات این میدانها توسط معادلات ماکسول به‌صورت زیر داده می‌شوند

$$\begin{aligned}
&(۱) \qquad \nabla\cdot\mathbf{E} = 4\pi\rho \\
&(۲) \qquad \nabla\cdot\mathbf{B} = 0 \\
&(۳) \qquad \nabla\times\mathbf{E} = -\frac{1}{c}\dot{\mathbf{B}} \\
&(۴) \qquad \nabla\times\mathbf{B} = \frac{1}{c}\dot{\mathbf{E}} + \frac{4\pi}{c}\mathbf{J}
\end{aligned} \qquad (۱۲-۱۲)$$

---

* در آنچه به‌دنبال می‌آید فرض می‌کنیم ذرات غیرنسبیتی هستند .

چگالیهای بار و جریان به‌وسیله روابط زیر به‌مختصات ذرات ارتباط پیدا می‌کنند

$$\rho = \sum_i q\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \qquad \text{و} \qquad \mathbf{J} = \sum_i q\mathbf{v}_i\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \qquad (۱۳ - ۱۲)$$

ساختن یک لاگرانژی برحسب $\mathbf{E}$ و $\mathbf{B}$ به‌عنوان مختصات میدان ،بیهوده‌است زیرا این میدانها مستقل نیستند . شش مولفه ($\mathbf{E}$ و $\mathbf{B}$) می‌توانند با استفاده از معادلات دوم وسوم ماکسول به‌چهار مولفه تقلیل یابند . معادله دوم ، $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ ، ایجاب می‌کند که $\mathbf{B}$ مشتق از یک پتانسیل برداری به‌صورت

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \qquad (۱۴ - ۱۲)$$

باشد . معادله سوم می‌تواند به‌صورت

$$\nabla \times \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c}\dot{\mathbf{A}}\right) = \mathbf{0}$$

نوشته شودکه به‌ما اجازه می‌دهد یک پتانسیل نرده‌ای Φ به‌گونه‌ای تعریف کنیم که‌داشته‌باشیم

$$\mathbf{E} + \frac{1}{c}\dot{\mathbf{A}} = -\nabla\Phi \qquad \text{یا} \qquad \mathbf{E} = -\nabla\Phi - \frac{1}{c}\dot{\mathbf{A}} \qquad (۱۵ - ۱۲)$$

سه مولفه $\mathbf{A}$ همراه با Φ چهار مولفه میدان را نمایش می‌دهند . گرچه این چهار مولفه هنوز کاملا" مستقل نیستند ، تقلیل نهائی را بعداز اینکه لاگرانژی و هامیلتونی ساخته‌شدند انجام‌می‌دهیم . معادلات حرکت (۱۲–۱۱) و (۱۲–۱۲)اکنون می‌توانندبا بیان $\mathbf{E}$ و $\mathbf{B}$ بر حسب $\mathbf{A}$ و Φ نوشته شوند .

لاگرانژی کل سیستم الکترودینامیکی می‌تواند به‌صورت

$$L = \int (\mathscr{L}_{\text{part}} + \mathscr{L}_{\text{rad}} + \mathscr{L}_{\text{int}})\, d\mathbf{r} \qquad (۱۶ - ۱۲)$$

نوشته شود ، که در آن

$$\mathscr{L}_{\text{part}} = \sum_i \tfrac{1}{2}m\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)v_i^2$$

$$\mathscr{L}_{\text{rad}} = \frac{\left(-\nabla\Phi - \frac{1}{c}\dot{\mathbf{A}}\right)^2 - (\nabla \times \mathbf{A})^2}{8\pi} = \frac{E^2 - B^2}{8\pi}$$

$$\mathscr{L}_{\text{int}} = -\rho\Phi + \frac{\mathbf{J} \cdot \mathbf{A}}{c}$$

و ρ و $\mathbf{J}$ توسط (۱۲–۱۳) داده می‌شوند. تحقیق اینکه اعمال معادلات لاگرانژ به (۱۲–۱۶) هم قانون نیروی لورنتس برای ذرات و هم معادلات ماکسول برای میدانها را دوباره ایجاد می‌کند کاری است طولانی ولی سر راست*.

چگالی تکانه مزدوج با $\mathbf{A}$، با استفاده از (۱۲–۶)، عبارت است از

$$\mathbf{\Pi} = \frac{\delta L}{\delta \dot{\mathbf{A}}} = \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot{\mathbf{A}}} = \frac{1}{4\pi c}\left(-\nabla\Phi - \frac{1}{c}\dot{\mathbf{A}}\right) = \frac{\mathbf{E}}{4\pi c} \qquad (۱۲-۱۷)$$

چون Φ در $\mathscr{L}$ ظاهر نمی‌شود، چگالی تکانه مزدوج با آن صفر است. تبدیل لوژاندر برای ساختن H سرراست است و نتیجه آن عبارت است از

$$H = \int\left\{\frac{1}{8\pi}(E^2 + B^2) + \frac{\mathbf{E}\cdot\nabla\Phi}{4\pi}\right\} + \left\{\sum_i\left[\frac{(\mathbf{p}_i - (q/c)\,\mathbf{A})^2}{2m} + q\Phi\right]\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)\right\} d\mathbf{r} \qquad (۱۲-۱۸)$$

که در آن $\mathbf{E} = 4\pi c\mathbf{\Pi}$ و $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$.

مشاهده می‌شود که $\mathbf{A}$ و Φ فقط تا آنجا فیزیکی هستند که $\mathbf{E}$ و $\mathbf{B}$ بتوانند از آنها به دست آیند. بخصوص، تبدیل پیمانه‌ای

$$\mathbf{A} \to \mathbf{A} + \nabla\chi, \qquad \Phi \to \Phi - \frac{\dot{\chi}}{c}$$

که در آن χ یک نرده‌ای دلخواه است، میدانهای $\mathbf{E}$ و $\mathbf{B}$ در (۱۲–۱۴) و (۱۲–۱۵) را دست نخورده می‌گذارد (مسئله ۱۲–۳). این مطلب می‌تواند با جایگذاری مستقیم، و با توجه به اینکه تاو گرادیان هر تابع χ صفر است، مشاهده شود. بنابراین، این آزادی را داریم که $\mathbf{A}$ و Φ را با یک انتخاب مناسب χ محدود کنیم. پیمانهٔ لورنتس که در آن محدودیت $\nabla\cdot\mathbf{A} = \Phi/c$ را قائل می‌شویم، برای یک فرمولبندی‌که از نظرنسبیتی هموردا باشد مناسب است، اما به‌پیچیدگیهای زیادی در نظریه کوانتومی منجر می‌شود. یک پیمانه ساده‌تر برای مقاصد ما پیمانهٔ تابشی است که در آن

$$\nabla\cdot\mathbf{A} = 0 \qquad (۱۲-۱۹)$$

---

* به‌عنوان مثال به‌کتاب زیر مراجعه کنید

H. Goldstein, " Classical Mechanics", Chapter 11. Addison-wesley, Reading, Massachusetts, 1950.

با انتخاب این پیمانه ، همورداثی آشکار را به‌خاطر سادگی قربانی می‌کنیم ، مع ذالک نتایج معتبر باقی می‌مانند .

با قراردادن (۱۲–۱۵) در اولین معادله ماکسول خواهیم داشت

$$\nabla^2\Phi + \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}(\nabla\cdot\mathbf{A}) = -4\pi\rho$$

یا ، با استفاده از (۱۲–۱۹) ،

$$\nabla^2\Phi = -4\pi\rho \qquad \text{(معادله پواسن)} \qquad (۱۲-۲۰)$$

جواب (۱۲–۲۰) به‌وسیله قانون کولن ، یعنی ،

$$\Phi = \int\frac{\rho(\mathbf{r}')d\mathbf{r}'}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} = \int\frac{\sum_i q\delta(\mathbf{r}'-\mathbf{r}_i)\,d\mathbf{r}'}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}$$

داده می‌شود .به‌همین جهت پیمانه تابشی اغلب اوقات *پیمانه کولنی* نامیده‌می‌شود .در این پیمانه ، Φ به‌وسیله مکانهای لحظه‌ای ذرات باردار تعیین می‌شود و در غیاب آنها صفر است . در زیر خواهیم دید که Φ یک مختصه میدان تابشی در پیمانه تابشی نیست .

هرمیدان برداری همیشه می‌تواند به‌یک‌قسمت طولی (غیرچرخشی) و یک قسمت عرضی (سیملوله‌ای) ، به‌صورت زیر تجزیه شود

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}_L + \mathbf{A}_T \qquad (۱۲-۲۱\text{ الف})$$

این دو قسمت با ویژگیهای زیر تعریف می‌شوند

$$\nabla\cdot\mathbf{A}_T = 0, \qquad \nabla\times\mathbf{A}_L = 0 \qquad (۱۲-۲۱\text{ ب})$$

در پیمانهٔ تابشی (۱۲–۱۹) ، نتیجه می‌شود که $\mathbf{A}$ کاملا" عرضی است . پیمانه تابشی *پیمانهٔ* عرضی نیزنامیده می‌شود .ازمعادله دوم ماکسول ، $\nabla\cdot\mathbf{B} = 0$ ،نتیجه‌می‌شودکه $\mathbf{B}$ همیشه، بدون توجه به‌پیمانه ، عرضی است .

میدان الکتریکی ، از (۱۲–۱۷) ، عبارت است از

$$\mathbf{E} = 4\pi c\mathbf{\Pi} = -\nabla\Phi - \frac{1}{c}\dot{\mathbf{A}}$$

نتیجه می‌شود

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_{\mathrm{L}} + \mathbf{E}_{\mathrm{T}}$$

که در آن

$$\mathbf{E}_{\mathrm{L}} = -\nabla\Phi = 4\pi c\Pi_{\mathrm{L}} \qquad \text{و} \qquad \mathbf{E}_{\mathrm{T}} = -\frac{1}{c}\dot{\mathbf{A}} = 4\pi c\Pi_{\mathrm{T}} \qquad (۱۲-۲۲)$$

این تجزیه $\mathbf{E}$ در (۱۲–۲۲) در پیمانهٔ تابشی معتبر است زیرا تنها در این صورت $\dot{\mathbf{A}}$ عرضی خواهد بود. از (۱۲–۲۲) نتیجه خواهیم گرفت

$$E^2 = E_{\mathrm{T}}{}^2 + E_{\mathrm{L}}{}^2 + 2\mathbf{E}_{\mathrm{T}}\cdot\mathbf{E}_{\mathrm{L}} = E_{\mathrm{T}}{}^2 + E_{\mathrm{L}}{}^2 - 2\mathbf{E}_{\mathrm{T}}\cdot\nabla\Phi$$

و

$$\dot{\mathbf{E}}\cdot\nabla\Phi = \mathbf{E}_{\mathrm{T}}\cdot\nabla\Phi + \mathbf{E}_{\mathrm{L}}\cdot\nabla\Phi = \mathbf{E}_{\mathrm{T}}\cdot\nabla\Phi - E_{\mathrm{L}}{}^2$$

با استفاده از این روابط، هامیلتونی (۱۲–۱۸) خواهد شد

$$H = \int\left\{\frac{1}{8\pi}(E_{\mathrm{T}}{}^2 + B^2) + \frac{\mathbf{E}\cdot\nabla\Phi}{8\pi} - \frac{\mathbf{E}_{\mathrm{T}}\cdot\nabla\Phi}{8\pi}\right\}$$
$$+\left\{\sum_i\left[\frac{(\mathbf{p}_i - (q/c)\,\mathbf{A})^2}{2m} + q\Phi\right]\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i)\right\}d\mathbf{r} \qquad (۱۲-۲۳)$$

با انتگرال‌گیری به‌روش جزء به‌جزء، و نادیده گرفتن جمله سطحی که برای یک میدان فیزیکی در بینهایت صفر می‌شود، و با استفاده از

$$\nabla\cdot\mathbf{E} = 4\pi\rho = 4\pi\Sigma_i q\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i)$$

خواهیم داشت

$$\int\frac{\mathbf{E}\cdot\nabla\Phi}{8\pi}\,d\mathbf{r} = -\frac{1}{2}\int\frac{\nabla\cdot\mathbf{E}}{4\pi}\,\Phi\,d\mathbf{r} = -\frac{1}{2}\int\sum q\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i)\,d\mathbf{r}$$

و

$$\int\mathbf{E}_{\mathrm{T}}\cdot\nabla\Phi\,d\mathbf{r} = -\int\Phi\nabla\cdot\mathbf{E}_{\mathrm{T}}\,d\mathbf{r} = 0$$

با قراردادن این تساوی در (۱۲–۲۳) و با استفاده از ویژگیهای تابع دلتا، هامیلتونی الکترودینامیکی خواهد شد

$$H = \int \frac{1}{8\pi}(E_T{}^2 + B^2)\, d\mathbf{r} + \sum_i \left[\frac{(\mathbf{p}_i - (q/c)\,\mathbf{A}_i)^2}{2m} + \frac{1}{2}\, q\Phi_i\right]$$

با استفاده از قانون کولن برای Φ_i ، هامیلتونی الکترودینامیکی شکل نهائی

$$H = H_{\text{rad}} + H_{\text{part}} + H_{\text{int}}$$

را به‌خود می‌گیرد ، که در آن

$$\begin{aligned} H_{\text{rad}} &= \int \frac{1}{8\pi}(E_T{}^2 + B^2)\, d\mathbf{r} = \int \frac{1}{8\pi}[(4\pi c\mathbf{\Pi}_T)^2 + (\nabla \mathbf{x} \mathbf{A})^2]\, d\mathbf{r} \\ H_{\text{part}} &= \sum_i \frac{p_i{}^2}{2m} + \frac{1}{2}\sum_i \sum_j \frac{q^2}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|} \\ H_{\text{int}} &= \sum_i \left[-\frac{q}{mc}\,\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{A}_i + \frac{q^2}{2mc^2}\, A_i{}^2\right] \end{aligned} \qquad (۲۴ - ۱۲)$$

در پیمانه تابشی ، $\mathbf{E}_L$ و Φ در هامیلتونی تابش‌آزاد وارد نمی‌شوند . بلکه در برهم‌کنشهای کولنی الکتروستاتیکی بین ذرات شرکت می‌کنند . متاسفانه ، جمله کولنی در (۱۲ ــ ۲۴) انرژیهای خودی ذرات را در بر دارد . این اشکال از آنجا ناشی می‌شود که فرض کرده‌ایم ذرات نقطه‌ای هستند . در عمل ، اگر بارها از نظر تعداد پایسته باشند ، این انرژی خودی تغییر نمی‌کند و نمی‌تواند روی دینامیک ذرات تاثیر بگذارد . بنابراین در برهم‌کنشهای کولنی از جمله‌هایی که در آنها $i = j$ است صرفنظر می‌کنیم .

میدان تابشی فقط مولفه‌های عرضی‌را دخالت می‌دهد . سپس کوانتش این میدان‌تابشی آزاد ، یعنی ، وضعیتی را که در آن هیچ ذره‌ای حضور ندارد $(q = p_i = 0)$ ،بررسی می‌کنیم.

۵ ــ هم‌ارزی بین تابش‌آزاد و نوسانگرها

در حالی که ممکن است H_{rad} در (۱۲ــ۲۴) را مستقیما" کوانتیده کرد ، بهتر است که نخست میدان تابش‌آزاد را به‌صورت یک سری فوریه بسط دهیم . این‌کار از ابهامات وابسته به‌اثرات تاخیری در روابط جابه‌جایی میدانها جلوگیری می‌کند . فرض می‌کنیم که تابش در یک جعبه بزرگ به‌حجم $\mathscr{V}$ محبوس است و مدهای مشخصه کاواک را که امواج تختی به‌شکل

$$\mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda} = \frac{(4\pi)^{1/2} c}{\sqrt{\mathscr{V}}}\, \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda}\, e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \qquad (۲۵ - ۱۲)$$

هستند ، اختیار می‌کند . هر مد به‌وسیله یک بردار موج $\mathbf{k}$ و یک شاخص قطبش λ مشخص می‌شود . بردار قطبش طولی $\mathbf{e}_{\mathbf{k}}$ بردار واحدی در جهت $\mathbf{k}$ است ، در حالی که بردارهای عرضی $\mathbf{e}_{\mathbf{k},1}$ و $\mathbf{e}_{\mathbf{k},2}$ بر یکدیگر و بر $\mathbf{k}$ عموداند . این مدهای میدان دارای ویژگی تعامدزیراند

$$\int_{\mathscr{V}} \mathbf{u}^*_{\mathbf{k}\lambda} \cdot \mathbf{u}_{\mathbf{k}'\lambda'}\, d\mathbf{r} = 4\pi c^2 \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\lambda\lambda'} \qquad (۲۶-۱۲)$$

حالت عمومی تابش داخل کاواک به‌وسیله برهم‌نهش این‌مدها داده می‌شود و می‌توانیم بسط‌های زیر را انجام دهیم*

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) &= \sum_{\mathbf{k}\lambda} q_{\mathbf{k}\lambda}(t)\mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r}) \\ \mathbf{\Pi}_{\mathrm{T}}(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{4\pi c^2} \sum_{\mathbf{k}\lambda} p_{\mathbf{k}\lambda}(t)\mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r}) \end{aligned} \qquad (۲۷-۱۲)$$

که در آن $q_{\mathbf{k}\lambda}$ و $p_{\mathbf{k}\lambda}$ ، ضرایب حقیقی بسط هستند که به‌وسیله شرایط اولیه تعیین می‌شوند . (توجه کنیم که ضرایب $q_{\mathbf{k}\lambda}$ و $p_{\mathbf{k}\lambda}$ فقط توابعی از زمان هستند و نه از مکان) . مقادیر مجاز $\mathbf{k}$ به‌وسیله‌شرایط مرزی که در دیواره‌های کاواک تحمیل می‌شوند ، تعیین می‌شوند . وقتی حجم محفظه بزرگ‌می‌شود ، عدد کوانتومی $\mathbf{k}$ شبه پیوسته می‌گردد . حاصل‌جمع ها شامل فقط قطبشهای عرضی $(\lambda = 1, 2)$ هستند زیرا هامیلتونی تابش آزاد شامل میدانهای کاملا"عرضی است .

عمل تاو گرفتن از موج تخت $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ منجر به‌ضرب آن در $i\mathbf{k} \times$ می‌شود . بنابراین داریم

$$\nabla \times \mathbf{A} = \sum_{\mathbf{k},\lambda=1,2} q_{\mathbf{k}\lambda}\, i\mathbf{k} \times \mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda} \qquad (۲۸-۱۲)$$

بااستفاده‌از روابط $\mathbf{k} \times \mathbf{u}_{\mathbf{k}1} = k\,\mathbf{u}_{\mathbf{k}2}$ و $\mathbf{k} \times \mathbf{u}_{\mathbf{k}2} = -k\,\mathbf{u}_{\mathbf{k}1}$ (رک شکل ۱۲-۱) همراه‌با (۱۲-۲۶)، بعد از مقداری ساده‌سازی خواهیم داشت

$$\int |\nabla \times \mathbf{A}|^2\, d\mathbf{r} = \sum_{\mathbf{k}\lambda=1,2} q^2_{\mathbf{k}\lambda} k^2 4\pi c^2 \qquad (۲۹-۱۲)$$

به‌طور مشابه ، با توجه به‌تعریف $\mathbf{\Pi}_{\mathrm{T}}$ در (۱۲-۲۷) ، خواهیم داشت

---

* به‌عبارت دقیقتر ،میدانها برای یک سیستم فیزیکی در (۱۲-۲۷) باید حقیقی باشند و در بینهایت صفر شوند . در حالی که مدهای (۱۲-۲۵) در این شرط صدق نمی‌کنند ، ولی محاسبات را به‌طور قابل ملاحظه‌ای ساده می‌کنند و با وجود این نتایج معتبرند .

$$|\mathbf{\Pi}_{\mathrm{T}}|^2 = \frac{1}{(4\pi c^2)^2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\lambda\lambda'} p_{\mathbf{k}'\lambda'} p_{\mathbf{k}\lambda} \mathbf{u}^*_{\mathbf{k}'\lambda'} \cdot \mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda} \qquad (۳۰ - ۱۲)$$

با قراردادن این نتایج در (۱۲–۲۴)، انتگرال‌گیری و استفاده از روابط تعامد (۱۲ – ۲۶) خواهیم داشت

$$H_{\mathrm{rad}} = \int \left[\frac{|4\pi c \mathbf{\Pi}_{\mathrm{T}}|^2 + |\nabla \times \mathbf{A}|^2}{8\pi} \right] d\mathbf{r} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\lambda=1,2} \left[\frac{p^2_{\mathbf{k}\lambda}}{2} + \frac{1}{2}\omega_k{}^2 q^2_{\mathbf{k}\lambda} \right] \qquad (۳۱ - ۱۲)$$

که در آن $\omega_k = ck$. *بنابراین هامیلتونی تابش آزاد معادل است با هامیلتونی یک مجموعه بینهایت از نوسانگرهای با جرم واحد که هرکدام وابسته به یکی از مدهای مشخصه‌اند.* ضرایب بسط $q_{\mathbf{k}\lambda}$ و $p_{\mathbf{k}\lambda}$ نقش متغیرهای بندادی برای هرکدام از نوسانگرهای مدرا ایفا می‌کنند. هر نوسانگر به‌وسیله یک بردار موج $\mathbf{k}$ و یک شاخص قطبش ۲ و ۱ = λ مشخص می‌شود. دراینجاست که به‌خاطر دانه‌ای نبودن میدان بینهایت نوسانگر (به‌جای N نوسانگر زنجیرگسسته در فصل ۱۰) داریم.

۶ـ کوانتش میدان (عرضی) تابش آزاد

کوانتش میدان تابشی با همان الگوی آشنای تبدیلات زیر به‌دست می‌آید

$$\mathbf{A} \to \hat{\mathbf{A}} = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \hat{q}_{\mathbf{k}\lambda} \mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda} = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \hat{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}\lambda} \qquad (۳۲ - ۱۲)$$

$$\mathbf{\Pi}_{\mathrm{T}} \to \hat{\mathbf{\Pi}}_{\mathrm{T}} = \frac{1}{4\pi c^2} \sum_{\mathbf{k}\lambda} \hat{p}_{\mathbf{k}\lambda} \mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda} = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \hat{\mathbf{\Pi}}_{\mathrm{T}\,\mathbf{k}\lambda} \qquad (۳۳ - ۱۲)$$

که در آنها

$$\hat{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}\lambda} = \hat{q}_{\mathbf{k}\lambda}\mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda} \qquad \text{و} \qquad \hat{\mathbf{\Pi}}_{\mathrm{T}\,\mathbf{k}\lambda} = \frac{1}{4\pi c^2} \hat{p}_{\mathbf{k}\lambda}\mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda}$$

با استفاده از (۱۲–۱۰)، روابط جابه‌جایی میدان برای مولفه‌های فوریه عرضی می‌شوند

$$[\hat{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}'\lambda'}(\mathbf{r}'), \hat{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r})] = [\hat{\mathbf{\Pi}}_{\mathrm{T}\,\mathbf{k}'\lambda'}(\mathbf{r}'), \hat{\mathbf{\Pi}}_{\mathrm{T}\,\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r})] = 0$$

$$(۳۴ - ۱۲)$$

$$[\hat{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}'\lambda'}(\mathbf{r}'), \hat{\mathbf{\Pi}}_{\mathrm{T}\,\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r})] = i\hbar\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\delta_{\lambda\lambda'}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

بر طبق اصل عدم قطعیت هایزنبرگ ، توانائی ما در اندازه‌گیری همزمان مولفه‌های فوریه عرضی $\hat{\mathbf{A}}$ و $\hat{\mathbf{\Pi}}_T$ در یک نقطه از فضا محدود است . با انتگرال‌گیری از (۱۲–۳۴) روی تمام فضا و با کاربرد (۱۲–۲۶) خواهیم یافت

$$[\hat{q}_{\mathbf{k}'\lambda'}, \hat{q}_{\mathbf{k}\lambda}] = [\hat{p}_{\mathbf{k}'\lambda'}, \hat{p}_{\mathbf{k}\lambda}] = 0$$
$$[\hat{q}_{\mathbf{k}'\lambda'}, \hat{p}_{\mathbf{k}\lambda}] = i\hbar\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\delta_{\lambda\lambda'} \qquad (۱۲ - ۳۵)$$

کوانتش هامیلتونی ،

$$\hat{H}_{\text{rad}} = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \tfrac{1}{2}\hat{p}^2_{\mathbf{k}\lambda} + \tfrac{1}{2}\omega_k{}^2\hat{q}^2_{\mathbf{k}\lambda} \qquad (۱۲ - ۳۶)$$

از الگوئی که مشخصه کوانتش برای نوسانگرهاست پیروی می‌کند . حالت تابش به‌وسیله یک حاصلضرب مستقیم حالتهای نوسانگر که هرکدام از آنها به‌یک مد مشخصه وابسته هستند ، نمایش داده می‌شود ، یعنی

$$|\text{rad}\rangle = |\nu_{\mathbf{k}_1\lambda_1}\rangle \otimes |\nu_{\mathbf{k}_2\lambda_2}\rangle \otimes \cdots = |\{\nu_{\mathbf{k}\lambda}\}\rangle \qquad (۱۲ - ۳۷)$$

که در آن $\nu_{\mathbf{k}\lambda}$ ها اعداد صحیح برانگیختگی مد $\mathbf{k}$ و λ هستند . وقتی دنباله اعداد صحیح برانگیختگی $\{\nu_{\mathbf{k}\lambda}\}$ مشخص شده باشد حالت تابش معلوم است ،انرژی حالت عبارت است از

$$\varepsilon(\text{rad}) = \sum_{\mathbf{k}\lambda} (\nu_{\mathbf{k}\lambda} + \tfrac{1}{2})\hbar\omega_k \qquad (۱۲ - ۳۸)$$

شباهت بین (۱۲–۳۸) و (۱۰–۷۳) پیشنهاد می‌کند که فوتون را به‌عنوان کوانتای میدان الکترومغناطیسی وارد کنیم . به هر مد فوتونی با انرژی $\varepsilon_k = \hbar\omega_k$ نسبت می‌دهیم .فوتون یک ذره کاملا" نسبیتی با جرم در حال سکون صفر است که با سرعت نور حرکت می‌کند .با قراردادن $m = 0$ در رابطه $\varepsilon = (P^2c^2 + m^2c^4)^{1/2}$ ، نتیجه میگیریم که تکانهٔ فوتون عبارت است از $\varepsilon/c = \hbar\omega_k/c$ یا به‌شکل برداری $\mathbf{P}_{\mathbf{k}} = \hbar\mathbf{k}$. اعداد صحیح دنباله برای یک حالت داده شده ، یعنی $\nu_{\mathbf{k}\lambda}$ ، به‌عنوان تعداد فوتونهای موجود از هرنوع تعبیر می‌شوند . حالت خلاء (تمام $\nu_{\mathbf{k}\lambda} = 0$)دارای انرژی

$$\varepsilon_{\text{vac}} = \sum_{\mathbf{k}\lambda}^{\infty} \tfrac{1}{2}\hbar\omega_k \to \infty$$

است . انرژی بینهایت خلاء مشخصه میدان الکترومغناطیسی است . اما ، چون این انرژی

ثابت است ، آنرا نادیده می‌گیریم ، همانطور که در مورد انرژی خودی بینهایت برهم‌کنش کولنی در (۱۲ـ۲۴) انجام دادیم .

۷ـ الکترودینامیک کوانتومی ـ گذارهای تابشی

ویژه حالتهای مانای یک سیستم الکترودینامیکی به‌وسیله ویژه‌بردارهای $\hat{H} = \hat{H}_{\text{rad}} + \hat{H}_{\text{part}} + \hat{H}_{\text{int}}$ نمایش داده می‌شوند . جمله‌برهم‌کنش،از(۱۲ـ۲۴)، عبارت‌است‌از

$$\hat{H}_{\text{int}} = -\sum_i \frac{q}{mc}\,\hat{\mathbf{p}}^{(i)}.\,\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}^{(i)}) + \sum_i \frac{q^2}{2mc^2}\,\hat{A}^2(\mathbf{r}^{(i)}) \qquad (۳۹-۱۲)$$

برای الکترونها ، ثابت پریشیدگی ، در یکاهای cgs ، مقدار زیر در نظر گرفته می‌شود

$$\lambda = \frac{q}{c} = \frac{4.8 \times 10^{-10}}{3 \times 10^{10}} \sim 10^{-20}$$

با صرفنظرکردن‌ازجمله دوم (چون شامل λ^2 است) ،برهم‌کنش می‌تواند به‌عنوان‌یک‌پریشیدگی مرتبه اول در نظر گرفته شده و به‌صورت

$$\hat{H}_{\text{int}} \simeq -\lambda \sum_i \frac{\hat{\mathbf{p}}^{(i)} \cdot \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}^{(i)})}{m} \qquad (۴۰-۱۲)$$

نوشته شود . با انتخاب $\hat{H}_0 = \hat{H}_{\text{rad}} + \hat{H}_{\text{part}}$ به‌عنوان هامیلتونی ناپریشیده ، ویژه تابعهای آن می‌توانند به‌صورت حاصلضرب مستقیم

$$|\alpha\rangle = |\text{rad} + \text{part}\rangle = |\text{rad}\rangle \otimes |\text{part}\rangle = |\{\nu_{\mathbf{k}\lambda}\}\rangle \otimes |i\rangle \qquad (۴۱-۱۲)$$

نوشته شود که درآن $|i\rangle$ نمایانگر یک ویژه حالت سیستم ذره‌ای است . حالت ناپریشیده وقتی معلوم می‌شود که هم حالتهای تابشی و هم حالتهای ذره‌ای هردو مشخص شده باشند . انرژی ناپریشیده حالت (با صرفنظرکردن از انرژی خلاء) عبارت است از

$$\varepsilon_\alpha = \varepsilon_{\text{rad}+\text{part}} = \varepsilon_i(\text{part}) + \sum_{\mathbf{k}\lambda} \nu_{\mathbf{k}\lambda}\,\hbar\omega_k \qquad (۴۲-۱۲)$$

واضح است که عملگرهای تابشی و ذره‌ای فقط روی کتهای مربوط به‌خودشان در (۱۲ـ۴۱)اثر می‌کنند .

فرض خواهیم کرد که پریشیدگی (۱۲ــ۴۰) گذارهایی را بین حالتهای ناپریشیده (۱۲ــ۴۱) القاء می‌کند. حالت اولیه را به‌صورت

$$|\alpha\rangle = |\{\nu_{\mathbf{k}\lambda}\}\rangle|i\rangle$$

خواهیم گرفت که دنباله $\{\nu_{\mathbf{k}\lambda}\}$ نمایانگر تعداد اولیه فوتونهای موجود هرنوع و $|i\rangle$ نمایانگر حالت اولیه سیستم ذره‌ای است. حالت نهائی به‌صورت

$$|\beta\rangle = |\{\nu'_{\mathbf{k}\lambda}\}\rangle|f\rangle$$

نوشته می‌شود. حالتهای تابشی اولیه و نهائی توزیعهای فوتونی متفاوتی دارند (یعنی، $\{\nu_{\mathbf{k}\lambda}\} \neq \{\nu'_{\mathbf{k}\lambda}\}$). سیستم ذره‌ای یک گذار از حالت $|i\rangle$ به‌یک حالت نهائی $|f\rangle$ انجام داده است. آهنگ گذار مرتبه اول به‌وسیله قاعده طلائی فرمی (۷ــ۷۱)

$$R_{\alpha\to\beta} = \frac{2\pi}{\hbar}\lambda^2\left[\langle\alpha|\sum_i \frac{\hat{\mathbf{p}}^{(i)}}{m}\cdot\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}^{(i)})|\beta\rangle\right]^2\rho_\beta\Big|_{\varepsilon_\alpha=\varepsilon_\beta} \qquad (۱۲-۴۳)$$

داده می‌شود که در آن $\lambda = q/c$.

رابطهٔ (۱۲ــ۴۳) را به‌یک سیستم ذره‌ای مرکب از یک الکترون هیدرژنی اعمال می‌کنیم. محاسبه (۱۲ــ۴۳) با مشاهدات زیر ساده می‌شود:

(۱) چون عملگرهای

$$\hat{\mathbf{p}} = \frac{\hbar}{i}\nabla$$

$$\hat{\mathbf{A}} = \frac{(4\pi c^2)^{1/2}}{\sqrt{\mathscr{V}}}\sum_{\mathbf{k}\lambda}\hat{q}_{\mathbf{k}\lambda}\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

به‌ترتیب فقط روی کتهای ذره‌ای و تابشی عمل می‌کنند، عناصر ماتریسی (۱۲ــ۴۳) می‌توانند به‌صورت زیر نوشته شوند

$$\left|\langle\alpha|\frac{\hat{\mathbf{p}}\cdot\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r})}{m}|\beta\rangle\right|^2 = \frac{4\pi c^2}{\mathscr{V}}\left|\sum_{\mathbf{k},\lambda}\langle\{\nu_{\mathbf{k}\lambda}\}|\hat{q}_{\mathbf{k}\lambda}|\{\nu'_{\mathbf{k}\lambda}\}\rangle\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda}\cdot\langle i|\frac{\hat{\mathbf{p}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{m}|f\rangle\right|^2 \qquad (۱۲-۴۴)$$

(۲) قاعده طلائی فقط گذارهای بین حالتهای با یک انرژی را در بر می‌گیرد و لازم است که داشته باشیم

$$\varepsilon_\alpha = \varepsilon_\beta$$

$$\varepsilon_i + \sum_{\mathbf{k}\lambda} \nu_{\mathbf{k}\lambda}\hbar\omega_k = \varepsilon_f + \sum_{\mathbf{k}\lambda} \nu'_{\mathbf{k}\lambda}\hbar\omega_k \qquad (۴۵-۱۲)$$

بر طبق نتایج فصل ۴، رابطه (۴ـ۵۳)، می‌توان عناصر ماتریسی تابشهای نوسانگر گونهٔ (۱۲ـ۴۴) را به‌صورت زیر نوشت

$$\langle\{\nu_{\mathbf{k}\lambda}\}|\sum_{\mathbf{k}\lambda}\hat{q}_{\mathbf{k}\lambda}|\{\nu'_{\mathbf{k}\lambda}\}\rangle = \sum_{\mathbf{k}\lambda}\langle\nu_{\mathbf{k}\lambda}|\hat{q}_{\mathbf{k}\lambda}|\nu'_{\mathbf{k}\lambda}\rangle$$

$$= \sum_{\mathbf{k}\lambda}\left[\frac{(\nu_{\mathbf{k}\lambda}+1)\hbar}{2\omega_k}\right]^{1/2}\delta_{\nu_{\mathbf{k}\lambda}+1,\,\nu'_{\mathbf{k}\lambda}}$$

$$+\left[\frac{\nu_{\mathbf{k}\lambda}\hbar}{2\omega_k}\right]^{1/2}\delta_{\nu_{\mathbf{k}\lambda}-1,\,\nu'_{\mathbf{k}\lambda}} \qquad (۴۶-۱۲)$$

به‌طورمعادل، تعداد فوتونهای هرنوع ممکن است فقط یکی افزایش(گسیل) یا کاهش(جذب) یابد و نه بیشتر. درنظریه‌پریشیدگی مرتبه بالاترفرایندهای چند فوتونی امکان‌پذیرهستند.

فرض خواهیم کرد که سیستم ذره‌ای، در این مورد اتم هیدرژن، گذاری انجام دهد که در آن $\varepsilon_i > \varepsilon_f$ باشد. برای برقراری اصل پایستگی انرژی، (۱۲ـ۴۵)، انرژی فوتون باید به‌اندازه $\varepsilon_i - \varepsilon_f$ افزایش یابد. اما، قاعده تک‌فوتونی در صورتی می‌تواند برقرار بماند که فقط و فقط فوتونهای با فرکانس

$$\omega_{if} = |\mathbf{k}|c = \frac{\varepsilon_i - \varepsilon_f}{\hbar}$$

گسیل شده باشند. این نکته پیشنهاد می‌کند که فقط دلتای اول کرونکر در (۱۲ـ۴۶) باید نگهداری شود (برای فرایند گسیل) و اینکه جمع باید روی حالتهای فوتونی با

$$|\mathbf{k}| = \frac{\omega_{if}}{c} = \frac{\varepsilon_i - \varepsilon_f}{\hbar c}$$

انجام گیرد.

(۴) چگالی حالتها (با ظرفنظرکردن از قطبش) برای یک فوتون با بردار موجی $\mathbf{k}$ از روابط زیر به‌دست می‌آید

$$\frac{\mathscr{V}\, d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} = \rho(\omega)\, d\varepsilon = \rho(\omega)\hbar\, d\omega$$

$$\frac{\mathscr{V} k^2\, dk}{(2\pi)^3}\, d\Omega_{\mathbf{k}} = \frac{\mathscr{V} \omega^2\, d\omega}{(2\pi c)^3}\, d\Omega_{\mathbf{k}} = \rho(\omega)\hbar\, d\omega$$

یا

$$\rho(\omega) = \frac{\mathscr{V} \omega^2}{(2\pi c)^3 \hbar}\, d\Omega_{\mathbf{k}} \qquad (۴۷-۱۲)$$

(۵) گذارهای نوری درهیدرژن شامل فوتونهائی هستندکه طول موج آنها خیلی‌بزرگتر ازابعاداتم است . بنابراین می‌توانیم بنویسیم $\lambda \gg r$ یا $\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} \ll 1$، به‌طوری که موج‌تخت عنصر ماتریسی ذره می‌تواند با $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \simeq 1$ تقریب زده شود . عنصر موردنظر خواهد شد

$$\langle f|\hat{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}|i\rangle \simeq \langle f|\hat{\mathbf{p}}|i\rangle \qquad (۴۸-۱۲)$$

این رابطه ،همان‌طور که خواهیم دید ، همان تقریب دوقطبی است که در فصل ۷ به‌کاررفت .

با قراردادن نتایج فوق در قاعده طلائی (۱۲–۴۳) ، و جانشین‌کردن جمع‌بندی روی $\mathbf{k}$ ها به‌وسیله انتگرال ، آهنگ گسیل را به‌صورت زیر به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} R_{\alpha\to\beta} &= \frac{2\pi}{\hbar}\frac{e^2}{c^2}\int\sum_{\lambda}\frac{4\pi c^2}{\mathscr{V}}\,\frac{\hbar(\nu_{\mathbf{k}\lambda}+1)}{2\omega_{fi}}\left|\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda}\cdot\langle f|\,\frac{\hat{\mathbf{p}}}{m}\,|i\rangle\right|^2\frac{\mathscr{V}\omega_{fi}^2}{(2\pi c)^3\hbar}\,d\Omega_{\mathbf{k}} \\ &= \frac{e^2\omega_{fi}}{2\pi c^3\hbar}\int\sum_{\lambda}(\nu_{\mathbf{k}\lambda}+1)\left|\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda}\cdot\langle f|\,\frac{\hat{\mathbf{p}}}{m}\,|i\rangle\right|^2 d\Omega_{\mathbf{k}} \end{aligned}$$

با استفاده از اتحاد

$$\frac{\hat{\mathbf{p}}}{m} = \frac{[\hat{\mathbf{r}}, \hat{H}]}{i\hbar}$$

می‌توان نوشت

$$\begin{aligned} \langle i|\,\frac{\hat{\mathbf{p}}}{m}\,|f\rangle &= \frac{1}{i\hbar}\langle i|\hat{\mathbf{r}}\hat{H} - \hat{H}\hat{\mathbf{r}}|f\rangle \\ &= \frac{\varepsilon_i - \varepsilon_f}{i\hbar}\langle i|\hat{\mathbf{r}}|f\rangle = \frac{\omega_{if}}{i}\langle i|\hat{\mathbf{r}}|f\rangle \end{aligned}$$

در این صورت آهنگ گسیل خواهد شد

$$R_{\alpha\to\beta} = \frac{e^2\omega_{if}^3}{2\pi\hbar c^3}\int d\Omega_{\mathbf{k}}\sum_{\lambda}(\nu_{\mathbf{k}\lambda}+1)|\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda}\cdot\langle i|\hat{\mathbf{r}}|f\rangle|^2 \qquad (۴۹-۱۲)$$

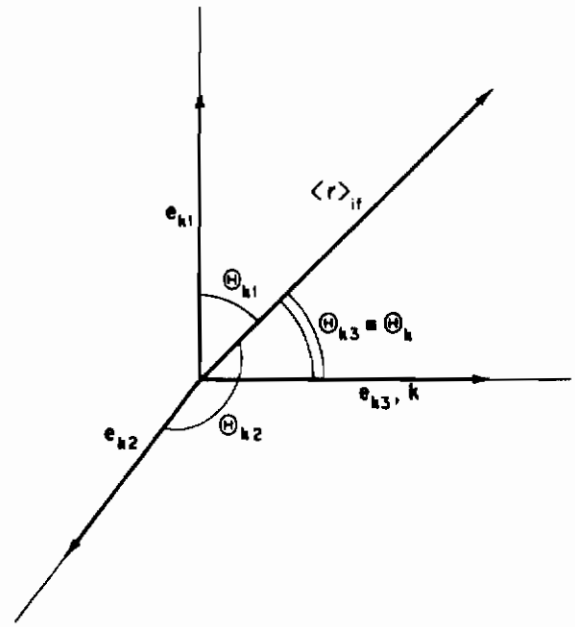
آهنگ جذب شبیه به‌رابطه فوق است به‌استثنای اینکه دلتای دوم کرونکر در (۱۲ـ۴۶) را نگه می‌داریم. به‌بیان دیگر، جمله $(\nu_{\mathbf{k}\lambda}+1)$ در (۱۲ـ۴۹) را به‌وسیله $\nu_{\mathbf{k}\lambda}$ برای جذب جایگزین می‌کنیم. توجه کنیم که انتگرال (۱۲ـ۴۹) روی کره‌ای به‌شعاع $k=\omega_{if}/c$ گرفته می‌شود.

اگر حالت اولیه تابش ناقطبیده باشد، اعداد صحیح اشغال مستقل از λ هستند و قرار می‌دهیم $\nu_{\mathbf{k}\lambda}=\nu_{\mathbf{k}}$. حاصل جمع قطبشی در (۱۲ـ۴۹) خواهد شد

$$\sum_{\lambda}(\nu_{\mathbf{k}\lambda}+1)|\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda}\cdot\langle i|\hat{\mathbf{r}}|f\rangle|^2=(\nu_{\mathbf{k}}+1)\sum_{\lambda=1,2}|\langle i|\hat{\mathbf{r}}|f\rangle|^2\cos^2\Theta_{\mathbf{k}\lambda}\qquad(۵۰-۱۲)$$

که در آن $\Theta_{\mathbf{k}\lambda}$ زاویه بین $\langle\mathbf{r}\rangle_{if}$ و $\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda}$ است (شکل ۱۲ـ۱). اما، چون حاصل جمع مربعهای سه‌کسینوس هادی برابر با یک است، داریم

$$\sum_{\lambda=1,2}\cos^2\Theta_{\mathbf{k}\lambda}=\cos^2\Theta_{\mathbf{k}1}+\cos^2\Theta_{\mathbf{k}2}=1-\cos^2\Theta_{\mathbf{k}3}=\sin^2\Theta_{\mathbf{k}}\qquad(۵۱-۱۲)$$



شکل (۱۲ـ۱) زاویه‌های $\Theta_{\mathbf{k}1}$، $\Theta_{\mathbf{k}2}$ و $\Theta_{\mathbf{k}3}$.

که در آن $\Theta_{\mathbf{k}}$ زاویه بین $\langle\mathbf{r}\rangle_{if}$ و $\mathbf{k}$ (یعنی، $\mathbf{e}_{\mathbf{k}3}$) است، اگر تابش همسانگرد باشد (تعداد فوتونها برای تمام جهتهای $\mathbf{k}$ یکسان‌اند) ν_k می‌تواند برابر $\nu_{\mathbf{k}}$ قرار داده شود و از زیر انتگرال بیرون بیاید. آهنگ گذار سرانجام خواهد شد

$$R_{\alpha\to\beta}\left(\begin{matrix}\text{گسیل}\\ \text{جذب}\end{matrix}\right)=\frac{e^2\omega_{if}^3}{2\pi\hbar c^3}\begin{Bmatrix}\nu_k+1\\ \nu_k\end{Bmatrix}\left[\int d\Omega_{\mathbf{k}}\sin^2\Theta_{\mathbf{k}}=\frac{8\pi}{3}\right]|\langle\mathbf{r}\rangle_{if}|^2$$

$$\left(k=\frac{\omega_{if}}{c}\right)\qquad(۵۲-۱۲)$$

آهنگ‌گسیل (جمله بالائی) از دوجمله تشکیل شده‌است . جمله اول شامل حالت تابش اولیه (یعنی ، ν_k) است و متناظر با گسیل القائی است . این جمله ، همانطور که از اصل برگشت‌پذیری میکروسکوپیکی انتظار می‌رود ، با آهنگ جذب القائی یکسان است . جمله دوم در آهنگ گسیل مستقل از حالت تابش اولیه است و حتی در غیاب تابش نیز رخ می‌دهد . این آهنگ خود به‌خودی از (۱۲–۵۲) به‌صورت

$$R_{\alpha\to\beta}^{\text{spont}} = \frac{4e^2\omega_{if}^3}{3\hbar c^3}\,|\langle i|\mathbf{r}|f\rangle|^2 \qquad (۱۲–۵۳)$$

نتیجه می‌شود و با ضریب " A " ی اینشتین که در (۷–۹۱) محاسبه شد یکی است . توجه کنیم که این نتیجه‌گیری کاملا" مکانیک کوانتومی است و روی توازن دقیق آماری تکیه نمی‌کند .

چگالی انرژی تابشی ، $\rho_{\text{rad}}(\omega)$ ، بر بازه فرکانس $d\omega$ به‌وسیله رابطه زیر تعریف می‌شود

$$2\nu_k\hbar\omega\,\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} = \rho_{\text{rad}}(\omega)\,d\omega$$

با استفاده از $\omega = ck$ ، این رابطه خواهد شد

$$2\nu_k\hbar\omega\,\frac{k^2\,dk\,d\Omega_{\mathbf{k}}}{(2\pi)^3} = 2\nu_k\hbar\omega\,\frac{\omega^2\,d\omega}{(2\pi c)^3}\,d\Omega_{\mathbf{k}} = \rho_{\text{rad}}(\omega)\,d\omega \qquad (۱۲ - ۵۴)$$

ضریب دو از دوحالت قطبش نتیجه می‌شود . همسانگردی تابش جایگذاری $d\Omega_{\mathbf{k}} \to 4\pi$ را مجاز می‌سازد . با حل معادله فوق برای ν_k ، خواهیم یافت

$$\nu_k = \frac{\pi^2c^3}{\omega^3\hbar}\,\rho_{\text{rad}}(\omega) \qquad \left(k = \frac{\omega}{c}\right) \qquad (۱۲ - ۵۵)$$

با قراردادن (۱۲–۵۵) در (۱۲–۵۲) نتیجه می‌شود

$$R_{\alpha\to\beta}^{(\text{induced absorption or emission})} = \frac{4\pi^2e^2}{3\hbar^2}\,|\langle i|\mathbf{r}|f\rangle|^2\rho_{\text{rad}}(\omega_{if}) \qquad (۱۲ - ۵۶)$$

که منجر به‌ضریب " B " ی اینشتین ، در توافق با (۷–۸۳) ، می‌شود .

آهنگهای گذار در (۱۲–۵۳) و (۱۲–۵۶) به‌شرطی معتبرند که میدان تابشی خیلی شدید نباشد ؛ در غیراین صورت ، نظریه مرتبه اول نامناسب است . هم‌چنین ، تقریب دوقطبی

برای گذارهایی که در آنها طول موج فوتونهای گسیل شده یا جذب شده در مقایسه با ابعاد سیستم اتمی بزرگ هستند معتبر است . درگذارهای نوری داریم $\lambda \simeq 5000$ Å ،درصورتی که ابعاد اتمی فقط $d \sim 1$ Å است .برای گسیل اشعه X ($\lambda \sim 1$ Å) ،تقریب دوقطبی به‌طور آشکاری نامناسب است .

کوانتش میدان مفهوم فوتون ذره‌مانند با انرژی $\varepsilon = \hbar\omega$ و تکانه $\mathbf{P} = \hbar\mathbf{k}$ را توجیه می‌کند .قطبش را می‌توان به‌حالت اسپینی فوتون ربط داد ,فوتون یک بوزونی‌است با اسپین واحد که جهتهای بالا و پائین آن با دو درجه قطبش عرضی متناظرند . جهت صفر اسپین وجود ندارد زیرا این جهت متناظر با قطبش طولی است ، که در تابش آزاد وجود ندارد (پیمانه عرضی) .

بالاخره ، چون لازم نیست تعداد فوتونها پایسته باشد ، توزیع حرارتی به‌وسیله‌فرمول بوز ــ اینشتین با پتانسیل شیمیائی مساوی با صفر ، یعنی

$$\bar{\nu}_k = \frac{1}{e^{+(\hbar\omega_k/k_B T)} - 1}$$

داده می‌شود . با استفاده از (۱۲ــ۵۵) ، انرژی موجود در این فوتونهای حرارتی با فرکانس ω عبارت است از

$$\rho_{\text{rad}}(\omega) = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^3}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1}$$

که دقیقا" همان فرمول پلانک (۷ــ۹۰) است .

۸ ــ پهن‌شدن خطوط طیفی ــ رابطه عدم قطعیت انرژی ــ زمان

تمام بحثهای ما برفرض وجود حالتهای واقعا" مقید مانا و امکان مشاهده دقیق‌مشخصات آنها استوار بوده‌اند . یک رابطه عدم قطعیت دیگر علاوه بر رابطه عدم قطعیت مکان ــ تکانه که در فصل ۳ آمد و مستقل از آن است وجود دارد . این اصل جدید دقت اندازه‌گیری‌انرژی یک حالت مانا را ، وقتی که این اندازه‌گیری در یک زمان محدودی انجام می‌گیرد ، محدود می‌کند . باید در نظر داشت که مفهوم یک حالت مقید مانا به‌طور زیرکانه‌ای دلالت براین دارد که از دیدگاه فیزیکی مشخصات حالت نسبت به‌انتقال در زمان تغییرناپذیر هستند . هر فرایند اندازه‌گیری که شامل کاوشی در انرژی وابسته به‌سیستم باشد ، که در یک بازهٔ

زمانی متناهی τ صورت گیرد ، این تغییرناپذیری را از بین می‌برد . نشان خواهیم داد که این امر منجر به‌عدم قطعیتی در اندازه‌گیری انرژی ، $\Delta\varepsilon$ ، می‌شود که با

$$\Delta\varepsilon \cdot \tau \simeq \hbar$$

داده می‌شود .

در استنتاج قاعده طلائی در فصل ۷ (رک ۷–۶۸) به‌احتمال‌گذار وابسته به‌زمان به‌صورت زیر رسیدیم

$$\mathscr{P}_{ij}(\tau) \propto \frac{(1-\cos\omega_{ij}\tau)}{\tau\omega_{ij}^2} = \frac{\left(1-\cos\left(\frac{\varepsilon_j-\varepsilon_i}{\hbar}\right)\tau\right)}{\tau\left[\frac{\varepsilon_j-\varepsilon_i}{\hbar}\right]^2}$$

این رابطه احتمال گذار بین ترازهای ε_i و ε_j را که به‌وسیله یک پریشیدگی ایستا القاء شده است ، به‌دست می‌دهد . این احتمال ، وجود گذار به‌حالتهای نهائی‌ای را ایجاب می‌کند که انرژیهای آنها با انرژی حالت اولیه ، به‌طور متوسط به‌اندازه

$$|\varepsilon_j-\varepsilon_i| = \Delta\varepsilon \simeq \frac{\hbar}{\tau}$$

تفاوت دارند .

می‌توان این نتیجه را این‌گونه تعبیر کرد که بگوئیم پریشیدگی ایستا مانند یک وسیلهٔ اندازه‌گیری انرژی سیستم ناپریشیده عمل می‌کند . به‌علاوه ، اگر وسیله برای یک مدت محدود τ عمل کند ، نتیجه اندازه‌گیری منجر به‌عدم قطعیت $\Delta\varepsilon$ در انرژی می‌شود . اگر $\tau \to \infty$ اندازه‌گیری مؤثر انرژی دقیق می‌شود .

لازم به‌تذکر است که این رابطه عدم قطعیت فقط به‌طول مدت τ بستگی دارد و نه به‌شدت پریشیدگی .

سیستمی مرکب از دو زیر سیستم که به‌طور ضعیفی برهم‌کنش می‌کنند ، به‌عنوان مثال ، جعبه‌ای شامل اتمها و تابش الکترومغناطیسی ، در نظر بگیریم . فرض کنیم که انرژی سیستم اتمی به‌وسیله برهم‌کنش با تابش اندازه‌گیری شود . چون این تابش گذارهایی را در سیستم اتمی القاء می‌کند ، اتمها به‌مدت زمان محدودی که طول عمر نامیده می‌شود و با

$$\tau_i = \frac{1}{\gamma_i}$$

داده می‌شود ،درحالتهای اولیه خود باقی می‌مانند . γ_i بیانگرآهنگ کل کاهش جمعیت‌تراز ε_i است که در اثر فوتونها القاء شده است . در واقع ، همان‌طور که دیدیم ، حتی در غیاب فوتونها (خلاء تابشی) ، عمر محدودی که ناشی از گسیل خود به‌خودی است وجود دارد . بنابراین انرژی یک تراز یک سیستم اتمی نمی‌تواند با دقتی بیشتراز

$$\Delta\varepsilon_i \sim \frac{\hbar}{\tau_i}$$

که در آن τ_i عمر مربوط به‌گسیل خود به‌خودی است ، اندازه‌گیری شود . این عدم قطعیت منجر به‌یک *پهنای طبیعی تراز* می‌شود و معنی آن این است که یک تراز اتمی حداکثر شبه گسسته است .

گذارهای بین حالتهائی که به‌طور طبیعی پهن شده‌اند منجر به‌گسیل (یا جذب) فوتونهائی با پهنای طیفی

$$\Delta\omega_{ij} = \frac{\Delta\varepsilon_i + \Delta\varepsilon_j}{\hbar} = \frac{1}{\tau_i} + \frac{1}{\tau_j} = \gamma_i + \gamma_j$$

می‌شوند .بنابراین خطوط طیفی یک اتم به‌طور طبیعی پهن هستند ،و پهنای هرخط به‌وسیله عمر حالتهای اولیه و نهائی وابسته به‌گذار تعیین می‌شود . این پهن‌شدگی زیربنای واقعیتی است‌که بنا به آن تابش، وقتی در یک مدت محدودی از زمان اندازه‌گیری می‌شود ،نمی‌تواند در یک حالت تکفام مشاهده شود .

مسائل

۱۲–۱ چگالی لاگرانژی ارتعاشات یک سیال ایده‌آل را به‌صورت

$$\mathscr{L} = \tfrac{1}{2}\rho_0\dot{\eta}^2 + P_0\nabla\cdot\boldsymbol{\eta} - \tfrac{1}{2}\gamma P_0(\nabla\cdot\boldsymbol{\eta})^2$$

در نظر بگیرید که در آن ρ_0 چگالی در حال تعادل ، P_0 فشار در حال تعادل و γ نسبت گرمای ویژه در فشار ثابت به‌گرمای ویژه در حجم ثابت سیال است. $\boldsymbol{\eta}(\mathbf{r}, t)$ را مختصه میدانی بگیرید که جابه‌جایی یک نقطه در داخل سیال در نقطه $\mathbf{r}$ و درزمان t را توصیف می‌کند .

(الف) چگالی تکانه مزدوج π_j را پیدا کنید .

(ب) معادله حرکت برای $\eta_j(\mathbf{r}, t)$ را پیدا کنید .

(ج) نشان دهید که چگالی موضعی سیال به‌وسیله

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \rho_0(1 + \xi(\mathbf{r}, t))$$

داده می‌شود که در آن

$$\xi = -\nabla \cdot \boldsymbol{\eta}$$

(د) قسمت (ب) را برحسب $\xi(\mathbf{r}, t)$ بیان کنید .

(هـ) با به‌کاربردن یک تبدیل لوژاندر ، چگالی هامیلتونی سیال را پیدا کنید .

۱۲–۲ تحقیق کنید که لاگرانژی (۱۲–۱۶) منجر به هامیلتونی (۱۲–۱۸) می‌شود .

۱۲–۳ نشان دهید که تبدیل پیمانه‌ای $\mathbf{A} \to \mathbf{A} + \nabla\chi$ و $\Phi \to \Phi - \dot{\chi}/c$ ، میدانهای $\mathbf{E}$ و $\mathbf{B}$ راتغییر نمی‌دهد .

۱۲–۴ اتحاد زیر را ثابت کنید

$$\frac{\hat{\mathbf{p}}}{m} = \frac{[\hat{\mathbf{r}}, \hat{H}]}{i\hbar} \qquad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(\hat{\mathbf{r}})$$

۱۲–۵ مقطع موثر یونش برای گسیل الکترون از حالت پایه هیدرژن را که در اثر اشعه X که به‌شکل یک موج الکترومغناطیسی تخت با فرکانس ω که در جهت محور z منتشرمی‌شود و در امتداد محور y قطبیده شده است القاء می‌شود ، پیدا کنید . فرض کنید $\hbar\omega \gg 13.6$ eV و از اسپین الکترون صرفنظر کنید . (راهنمائی : فرض کنید حالت‌اولیه مرکب است از یک الکترون هیدرژنی در حالت

$$\psi_i = \frac{1}{(\pi a^3)^{1/2}} e^{-r/a}$$

همراه با تعداد $n_{\mathbf{k}\lambda}$ فوتون که بردار تکانه آنها $(\mathbf{k})$ در امتداد محور z و بردارقطبش آنها در امتداد محور y است . حالت نهائی تشکیل شده است از یک فوتون کمتر (جذب) و یک الکترون آزاد در حالت

$$\psi_f = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}$$

که $\mathbf{P} = \hbar\mathbf{K}$ تکانه الکترون است . چگالی حالتهای نهائی الکترون (با صرفنظرکردن‌از اسپین) عبارت است از

$$\rho_{\mathbf{K}} = \frac{\mathscr{V}}{(2\pi)^3}\frac{mK}{\hbar^2}\,d\Omega_{\mathbf{K}}$$

به‌خاطر داشته باشید که $\hbar\omega = p^2/2m + 13.6\ \mathrm{eV}$) .

۱۲–۶ با استفاده از نتایج فوق ، نشان دهید که اگر الکترون در آغاز آزاد باشد اثر فوتو–الکتریکی(جذب فوتونی)نمی‌تواندصورت‌گیرد . (راهنمائی: قراردهید $\psi_i = e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}/\sqrt{\mathscr{V}}$)

۱۲–۷ عملگر (۱۲–۴۰) عبارت‌است ازحاصلضرب عملگرهای جابه‌جاناپذیر وبنابراین‌عموماً" هرمیتی نیست .نشان دهید که این مطلب تاثیری روی نتایج (۱۲–۴۴) نمی‌گذارد . (راهنمائی: نشان دهید که در پیمانه عرضی ، جملات (۱۲–۴۴) با عوض‌کردن $\hat{\mathbf{p}}$ با $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ دست‌نخورده باقی می‌مانند) .

مراجع پیشنهادی

Berestetskii, V. B., Lifshitz, E. M., and Pitaevskii, L. P., "Relativistic Quantum Theory." Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1971.

Bjorken, J. D., and Drell, S. D., "Relativistic Quantum Fields." McGraw-Hill, New York, 1965.

Goldstein, H., "Classical Mechanics." Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1950.

Heitler, W., "Quantum Theory of Radiation," 3rd ed. Oxford Univ. Press, London and New York, 1954.

Messiah, A., "Quantum Mechanics," Vol. II. Wiley, New York, 1962.

Schiff, L. I., "Quantum Mechanics," 3rd ed. McGraw-Hill, New York, 1968.

Yourgrau, W., and Mandelstam, S., "Variational Principles in Dynamics and Quantum Theory," 3rd ed. Saunders, Philadelphia, 1968.

پیوست الف

تقریب وِنتزل ـ کرامرز ـ بریلوئن (WKB یا "انتگرال فاز")

معادله شرودینگر یک بعدی برای ذره‌ای در یک پتانسیل $V(x)$ با انرژی $\varepsilon > V(x)$ را در نظر بگیرید

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right\}\psi = \varepsilon\psi$$

یا

$$\left\{\frac{d^2}{dx^2} + k^2(x)\right\}\psi = 0 \qquad \text{(الف ـ ۱)}$$

که در آن

$$k(x) = \left[\frac{2m(\varepsilon - V(x))}{\hbar^2}\right]^{1/2}$$

اگر $V(x)$ برابر با مقدار ثابتی، مثلاً V_0، باشد، جواب (الف ـ ۱) عبارت است از $\psi = e^{\pm ik_0x}$ که در آن

$$k_0 = \left[\frac{2m(\varepsilon - V_0)}{\hbar^2}\right]^{1/2}$$

موردی را در نظر بگیریم که در آن $V(x)$ به‌آهستگی تغییر می‌کند و جوابی به‌شکل

$$\psi = e^{iu(x)} \qquad \text{(الف ــ ۲)}$$

را آزمایش کنیم . با قراردادن این جواب در (الف ــ ۱) خواهیم داشت

$$iu'' - (u')^2 + k^2 = 0 \quad \text{یا} \quad u' = \pm(k^2 + iu'')^{1/2} \qquad \text{(الف ــ ۳)}$$

اگر V ثابت باشد از (الف ــ۲) انتظار داریم که $u \to \pm k_0 x$ ، $u' \to \pm k_0$ و $u'' = 0$ باشد .این انتظار با (الف ــ۳) سازگار است . اما اگر V به‌کندی تغییر کند ، در (الف ــ۳) با تقریب مرتبه اول قرار می‌دهیم $u'' = 0$ و نتیجه می‌گیریم

$$u' = \pm k(x)$$

که پس از انتگرال‌گیری منجر می‌شود به

$$u = \pm \int k(x)\, dx + C$$

با قراردادن این‌نتیجه ، یعنی ، $u'' = \pm k'(x)$ ، در طرف راست (الف ــ۳) نتیجه بهتری به‌دست می‌آوریم که عبارت است از

$$u' = \pm(k^2 \pm ik')^{1/2}$$

یا

$$u = \pm \int (k^2 \pm ik')^{1/2}\, dx + C$$

با استفاده از (الف ــ۲) ، جواب تقریبی معادله شرودینگر می‌شود

$$\psi \simeq \exp[\pm i \int (k^2 \pm ik')^{1/2}\, dx] \qquad \text{(الف ــ۴)}$$

ثابت e^C حذف شده است زیرا ، حداکثر ، در بهنجارش ψ تاثیر می‌گذارد .اکنون فرض‌کنیم که پتانسیل به‌کندی تغییر کند ، به‌طوری که داشته باشیم

$$|k'| \ll k^2 \qquad \text{(الف ــ ۵)}$$

در این مورد ، رادیکال موجود در (الف ــ۴) می‌تواند بسط داده شود و نتیجه دهد

$$\psi \simeq \exp \pm i \int \left(k \pm \frac{i}{2}\frac{k'}{k}\right) dx = \exp[-\tfrac{1}{2}\ln k] \exp[\pm i \int k\, dx]$$

یا

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{k}} \exp[\pm i \int k\, dx] \qquad \text{(الف ـ ۶)}$$

که در آن

$$k(x) = \left[\frac{2m(\varepsilon - V)}{\hbar^2}\right]^{1/2}$$

معادله (الف ـ۶) به‌تقریب WKB برای حل (الف ـ۱) موسوم است .

در موردی که $V(x) > \varepsilon$ باشد ، می‌توان نشان داد که تابع تقریبی به‌شکل

$$\psi \simeq \frac{1}{\sqrt{K}} \exp(\pm \int K\, dx) \qquad \text{(الف ـ ۷)}$$

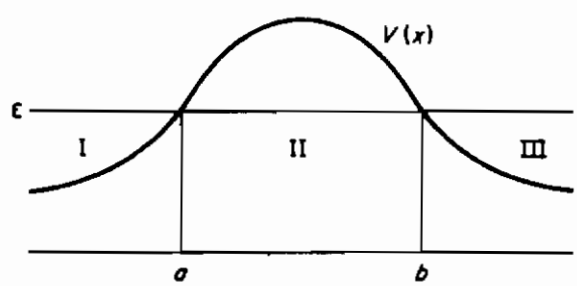
در می‌آید که در آن

$$K(x) = \left[\frac{2m(V - \varepsilon)}{\hbar^2}\right]^{1/2}$$

هم (الف ـ ۶) و هم (الف ـ ۷) در آن نواحی‌ای معتبرند که داشته باشیم

$$|k'| \ll k^2 \quad \text{یا} \quad |K'| \ll K^2 \qquad \text{(الف ـ ۸)}$$

فرض کنیم با یک سد پتانسیل $V(x)$ سروکار داریم که انرژی ذره کمتر از قله سد باشد (شکل الف ـ۱) . توجه کنیم که درنقاط بازگشت کلاسیکی ($x = a$ و $x = b$)، k (یا K)صفر می‌شود . در نتیجه (الف ـ ۵) نمی‌تواند برقرار باشد و تقریب WKB در این نقاط با شکست مواجه می‌شود .



شکل (الف ـ۱)

فرض کنیم جواب عمومی معادله شرودینگر (الف ـ۱) را که در شرایط پیوستگی در $x = a$ و $x = b$ صدق می‌کند ، می‌دانیم . در ناحیه I به‌اندازه کافی دور از $x = a$ ، این

جواب می‌تواند به‌طور تقریب به‌وسیله تابع WKB به‌صورت

$$\psi_{\mathrm{I}} \simeq \frac{A}{\sqrt{k}} \exp\left(i \int_a^x k\, dx\right) + \frac{B}{\sqrt{k}} \exp\left(-i \int_a^x k\, dx\right)$$

$$\left(k = \left[\frac{2m(\varepsilon - V(x))}{\hbar^2}\right]^{1/2}\right) \qquad \text{(الف ــ۹ الف)}$$

به‌دست آید . انتخاب حدهای پائین در انتگرالها مهم نیستند زیرا صرفا" در ضرایب A و B که در این نقطه اختیاری هستند ، موءثرند . برای نواحی II و III داریم

$$\psi_{\mathrm{II}} \simeq \frac{C}{\sqrt{K}} \exp\left(\int_a^x K\, dx\right) + \frac{D}{\sqrt{K}} \exp\left(-\int_a^x K\, dx\right) \qquad \text{(الف ــ ۹ ب)}$$

و

$$\psi_{\mathrm{III}} \simeq \frac{E}{\sqrt{K}} \exp\left(i \int_a^x k\, dx\right) + \frac{F}{\sqrt{K}} \exp\left(-i \int_a^x k\, dx\right) \qquad \text{(الف ــ ۹ ج)}$$

که در آنها

$$K = \left[\frac{2m(V(x) - \varepsilon)}{\hbar^2}\right]^{1/2}$$

این تقریبها تا وقتی قابل قبول‌اند که در نزدیکی $x = a$ یا $x = b$ نباشیم . می‌ماند ثابتهای A ، B ، C ، D ، E و F که باید تعیین شوند .به‌نظرجالب می‌آید که با تحمیل شرایط پیوستگی در $x = a$ و $x = b$ به (الف ــ۹) معادلاتی برای این ثابتها ایجادکنیم .این اقدام کاملا" نادرست است زیرا جوابهای (الف ــ۹) فقط دوراز نقاط بازگشت کلاسیکی معتبراند .

از یک نظر ، جوابهای WKB رفتارمجانبی جواب درست را در هردوطرف ، اما دور از نقاط بازگشت کلاسیکی ، توصیف می‌کنند . در نزدیکی این نقاط یک تقریب کاملا" متفاوتی موردنیاز است . آنچه که ما به‌دنبال آن هستیم *فرمولهای رابطی* هستند که جوابهای WKB را به‌طور آرام از طریق این توابع "مجاور" به‌یکدیگر ربط می‌دهند . ریاضیات لازم برای برقراری این فرمولها خارج از بحث این کتاب است . نتایج به‌صورت زیر هستند*:

---

* به‌عنوان مثال به‌کتابهای زیر مراجعه کنید

P. stehle, " Quamtum Mechanics", Holden-Day, San Fransisco, 1966.

S. Borowitz, " Fundamentals of Quantum Mechanics", Benjamin, New York, 1967.

مورد (الف) نقطه بازگشت در سمت چپ ناحیه‌ای که از نظر کلاسیکی ممنوع است ($x = a$ در شکل الف ــ۱) قرار دارد

$$\begin{array}{ccc} x < a & & x > a \\ \frac{2}{\sqrt{k}} \cos\left[\int_x^a k\,dx - \frac{1}{4}\pi\right] & \leftarrow & \frac{1}{\sqrt{K}} \exp\left(-\int_a^x K\,dx\right) \end{array} \qquad \text{(الف ــ ۱۰ الف)}$$

$$\frac{1}{\sqrt{k}} \sin\left[\int_x^a k\,dx - \frac{1}{4}\pi\right] \rightarrow \frac{-1}{\sqrt{K}} \exp\left(\int_a^x K\,dx\right) \qquad \text{(الف ــ ۱۰ ب)}$$

مورد (ب) نقطه بازگشت در سمت راست ناحیه‌ای که از نظر کلاسیکی ممنوع است ($x = b$ در شکل الف ــ۱) قرار دارد

$$\begin{array}{ccc} x < b & & x > b \\ \frac{1}{\sqrt{K}} \exp\left(-\int_x^b K\,dx\right) & \rightarrow & \frac{2}{\sqrt{k}} \cos\left(\int_b^x k\,dx - \frac{1}{4}\pi\right) \end{array} \qquad \text{(الف ــ ۱۰ ج)}$$

$$\frac{-1}{\sqrt{K}} \exp\left(\int_x^b K\,dx\right) \leftarrow \frac{1}{\sqrt{k}} \sin\left(\int_b^x k\,dx - \frac{1}{4}\pi\right) \qquad \text{(الف ــ ۱۰ د)}$$

این فرمولهای رابط جوابهای نمائی را به‌جوابهای نوسانی در نقاط بازگشت ربط می‌دهند . پیکانها جهت ارتباط را نشان می‌دهند ، گرچه با جهت ارتباط کاری نخواهیم داشت .

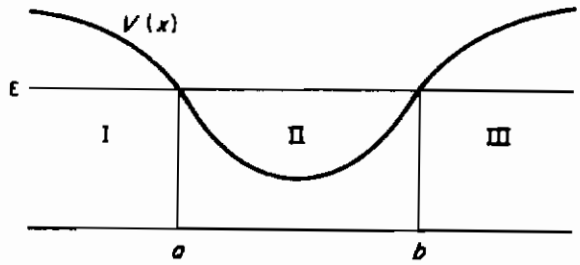
نسبتهای ثابتهای وابسته به‌جوابهای مربوط به‌سه ناحیه که به‌وسیله (الف ــ۹) داده شده‌اند ، اکنون می‌توانند با استفاده از فرمولهای رابط به‌عنوان شرایط "مرزی" به دست آیند . ریاضیات مربوطه سرراست ولی طولانی است . ضریب عبور در تقریب WKB به‌صورت زیر حاصل می‌شود

$$\mathscr{T} = \left|\frac{E}{A}\right|^2 = \left[\exp\left(\int_a^b K\,dx\right) + \frac{1}{4}\exp\left(-\int_a^b K\,dx\right)\right]^{-2}$$

برای سدهای بلند و پهن ، نمای منفی داخل کروشه می‌تواند نادیده گرفته شود و داریم

$$\mathscr{T} \simeq \exp\left(-2\int_a^b K\,dx\right) \qquad \left(K = \left[\frac{2m(V(x) - \varepsilon)}{\hbar^2}\right]^{1/2}\right) \qquad \text{(الف ــ ۱۱)}$$

تقریب WKB هم چنین می‌تواند به‌حالات مقید یک پتانسیل جاذبه ، شبیه آنچه که در شکل (الف ــ ۲) نمایش داده شده است ، به‌کار رود . در اینجا نقطه بازگشت کلاسیکی $x = a$



(شکل الف ــ ۲)

در سمت راست ناحیه I که از نظر کلاسیکی ممنوع است قرار دارد درصورتی‌که $x = b$ درسمت چپ ناحیه III که از نظرکلاسیکی ممنوع‌است‌واقع شده‌است . توابع قابل‌قبول (یعنی ،آنهائی که در $x = \pm\infty$ صفر می‌شوند) به‌شکل زیر هستند

$$\psi_{\mathrm{I}} \simeq \frac{A}{\sqrt{K}} \exp\left(\int_a^x K\, dx\right)$$

$$\psi_{\mathrm{II}} \simeq \frac{B}{\sqrt{k}} \exp\left(i \int_b^x k\, dx\right) + \frac{C}{\sqrt{k}} \exp\left(-i \int_b^x k\, dx\right)$$

$$\psi_{\mathrm{III}} \simeq \frac{D}{\sqrt{K}} \exp\left(-\int_b^x K\, dx\right)$$

فرمول رابط(الف ــ۱۰ ج) را به ψ_{I} و ψ_{II} در $x = a$ اعمال می‌کنیم . با نوشتن

$$\psi_{\mathrm{I}} = \frac{A}{\sqrt{K}} \exp\left(-\int_x^a K\, dx\right)$$

توجه کنیم که این تابع باید ، با استفاده از (الف ــ ۱۰ ج) ، به

$$\psi_{\mathrm{II}} \simeq \frac{2A}{\sqrt{k}} \cos\left(\int_a^x k\, dx - \frac{1}{4}\pi\right)$$

متصل شود که می‌تواند ، با استفاده از $\cos\theta = \sin(\theta + \frac{1}{2}\pi)$ ، به‌صورت زیرنیزنوشته‌شود

$$\psi_{II} \simeq \frac{2A}{\sqrt{k}} \cos\left(\int_a^b k\,dx - \int_x^b k\,dx - \frac{1}{4}\pi\right)$$
$$= \frac{2A}{\sqrt{k}} \sin\left(\int_a^b k\,dx - \int_x^b k\,dx + \frac{1}{4}\pi\right)$$

با استفاده از اتحاد $\sin(A-B) = \sin A \cos B - \cos A \sin B$ رابط فوق می‌تواند به‌شکل زیر در آید

$$\psi_{II} \simeq \left[\sin \int_a^b k\,dx\right]\left[\frac{2A}{\sqrt{k}} \cos\left(\int_x^b k\,dx - \frac{1}{4}\pi\right)\right]$$
$$- \left[\cos \int_a^b k\,dx\right]\left[\frac{2A}{\sqrt{k}} \sin\left(\int_x^b k\,dx - \frac{1}{4}\pi\right)\right] \qquad \text{(الف ــ ۱۲)}$$

اما ، در $x = b$ ، جمله دوم (بنابر (الف ــ۱۰ ب)) به‌یک نمایی صعودی در ناحیه III متصل می‌شود . چون حالت مقید است چنین جمله‌ای نباید وجود داشته باشد و تنها در صورتی جواب قابل قبولی داریم که ضریب جمله سینوسی در (الف ــ۱۲) صفر شود ، یعنی ،

$$\cos \int_a^b k\,dx = 0 \qquad \text{یا} \qquad \int_a^b k_n\,dx = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi \qquad \text{(الف ــ ۱۳)}$$

چون داریم

$$k_n = \left[\frac{2m(\varepsilon_n - V)}{\hbar^2}\right]^{1/2}$$

(الف ــ۱۳) در حقیقت یک شرط کوانتش برای انرژی است . شرط (الف ــ ۱۳) می‌تواند به‌صورت

$$\frac{2}{\hbar}\int_a^b [2m(\varepsilon_n - V)]^{1/2}\,dx = (n + \tfrac{1}{2})2\pi$$

یا

$$2\int_a^b p_n(x)\,dx = (n + \tfrac{1}{2})h$$

نوشته شود . انتگرال طرف چپ انتگرالی روی حرکت کلاسیکی از a به b و سپس به a است و می‌تواند به‌صورت

$$J_n = \oint p_n \, dx = (n + \tfrac{1}{2})h \qquad \text{(الف ــ ۱۴)}$$

نوشته شود ، که در آن J *انتگرال فاز* نامیده می‌شود .معادله (الف ــ۱۴) تعمیمی است از آنچه که تحت عنوان قواعد کوانتش ویلسون ــ سامرفلد خوانده می‌شود .

با اعمال (الف ــ۱۳) به‌نوسانگر ، قرار می‌دهیم $V = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ و نتیجه می‌گیریم

$$\int_a^b \left[\frac{2m\varepsilon_n - m^2\omega^2x^2}{\hbar^2}\right]^{1/2} dx = (n + \tfrac{1}{2})\pi$$

نقاط بازگشت کلاسیکی در $a = -(2\varepsilon/m\omega^2)^{1/2}$ و $b = (2\varepsilon/m\omega^2)^{1/2}$ هستند .ازمحاسبه انتگرال طرف چپ نتیجه می‌شود

$$\frac{\pi\varepsilon_n}{\hbar\omega} = (n + \tfrac{1}{2})\pi \qquad \text{یا} \qquad \varepsilon_n = (n + \tfrac{1}{2})\hbar\omega$$

که همان نتیجه شناخته شده برای نوسانگر است .

جواب WKBی (الف ــ۲) می‌تواند در سه‌بعدی (با قراردادن $u(\mathbf{r}) = W(\mathbf{r})/\hbar$) به‌صورت

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{iW(\mathbf{r})/\hbar} \qquad \text{(الف ــ ۱۵)}$$

نوشته شود . با قراردان این جواب در معادله ویژه مقداری شرودینگر

$$\left\{\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right\}\psi(\mathbf{r}) = \varepsilon\psi(\mathbf{r}) \qquad \text{(الف ــ ۱۶)}$$

نتیجه می‌گیریم

$$\frac{1}{2m}(\nabla W)^2 - [\varepsilon - V(\mathbf{r})] - \frac{i\hbar}{2m}\nabla^2 W = 0 \qquad \text{(الف ــ ۱۷)}$$

توجه کنیم که ثابت پلانک h فقط در جمله آخر طرف چپ در (الف ــ۱۷) وارد می‌شود . در حد کلاسیکی ، $h \to 0$ ، داریم

$$\frac{1}{2m}(\nabla W)^2 + V(r) = \varepsilon \qquad \text{(الف ــ ۱۸)}$$

معادله (الف ــ ۱۸) به *معادله هامیلتون ــ ژاکوبی* مستقل از زمان برای تابع مشخصه هامیلتون

W موسوم است . یک حل این معادله منجر به‌جواب مسئله کلاسیکی می‌شود*. روش WKB تصحیحاتی در این نتیجه کلاسیکی برحسب توانهای h فراهم می‌کند**.

یک شباهت جالب بین مکانیک کوانتومی و اپتیک وجود دارد . در اپتیک ، جوابهای معادله

$$\nabla^2\phi + k^2\phi = 0 \qquad \text{(الف ــ ۱۹)}$$

را جستجو می‌کنیم که در آن $k(\mathbf{r})$ بردار موج و $\phi(\mathbf{r})$ " تابع " موج است . بردار موج می‌تواند به‌صورت

$$k(\mathbf{r}) = k_0 n(\mathbf{r})$$

که در آن

$$k_0 = \frac{\omega}{c} = \frac{2\pi}{\lambda}$$

و $n(\mathbf{r})$ ضریب شکست موضعی‌است ،بیان شود . معادله (الف ــ ۱۹) مشابه (الف ــ ۱۶)است به‌شرط اینکه "ضریب شکست " مکانیک کوانتومی را با

$$n_{\text{quant}}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{\varepsilon - V(\mathbf{r})}{\varepsilon}}$$

مشخص کنیم . با قراردادن یک جواب آزمایشی به‌شکل

$$\phi = e^{ik_0 L(\mathbf{r})} \qquad \text{(الف ــ ۲۰)}$$

در (الف ــ۱۹) به‌معادله‌ای به‌شکل زیر برای L هدایت می‌شویم

$$ik_0 \nabla^2 L - k_0^2 (\nabla L)^2 + n^2 k_0^2 = 0 \qquad \text{(الف ــ ۲۱)}$$

---

* به‌کتاب زیر مراجعه کنید

H. Goldstein," classical Mechanics",Addison-wesley, Reading, Massachusetts, 1950.

** به‌کتاب زیر مراجعه کنید

S. Borowitz, "Fundamentals of Quantum Mechanics", Benjamin, New York, 1967.

معادله (الف ــ ۲۱) مشابه با (الف ــ۱۷) است . در حد نور هندسی ($\lambda \to 0$) به‌این نتیجه می‌رسیم که k_0 باید بزرگ باشد و جمله اول (الف ــ۲۱)می‌تواند حذف شود و نتیجه‌می‌شود

$$(\nabla L)^2 = n^2 \qquad \text{(الف ــ ۲۲)}$$

معادله (الف ــ۲۲) به‌*معادله آیکونال* موسوم است و معادله بنیادی نور هندسی است . این معادله مشابه با معادله هامیلتون ــ ژاکوبی (الف ــ۱۸) است . تابع L *طول مسیر نوری* یا *آیکونال* نامیده می‌شود .

این مشابهت می‌تواند این‌طور خلاصه شود که مکانیک کلاسیکی (معادله هامیلتون ــ ژاکوبی) نمایانگر حد هندسی مکانیک کوانتومی (معادله شرودینگر) در حد $h \to 0$ است .

پیوست ب

تصویرهای هایزنبرگ و برهم‌کنش

در تصویر شرودینگر ، عملگرها می‌توانند فقط طبق یک بستگی صریح زمانی ، تحـــول پیدا کنند ، یعنی

$$\hat{A}_S = \hat{A}(t)$$

برای سهولت ، $t_0 = 0$ را به‌عنوان زمان اولیه در نظر می‌گیریم . بردارهای حالت در تصویـر شرودینگر به‌صورت

$$|\beta, t\rangle_S = e^{-i\mathscr{H}t/\hbar}|\beta, 0\rangle$$

تحول می‌یابند ، که در آن فرض کرده‌ایم هامیلتونی $\mathscr{H}$ مستقل‌از زمان است . بستگی زمانی مقادیر قابل انتظار به‌وسیله رابطه زیر داده می‌شود

$$\langle A(t)\rangle = \langle\beta, t|_S\, \hat{A}_S|\beta, t\rangle_S = \langle\beta, 0|e^{i\mathscr{H}t/\hbar}\hat{A}(t)e^{-i\mathscr{H}t/\hbar}|\beta, 0\rangle \qquad (\text{ب} - ۱)$$

اگر بردارهای حالت را در همان مقادیرشان در $t = 0$ ثابت نگه داریم و اجازه‌دهیـم که عملگرها به‌صورت

$$\hat{A}_H = e^{i\mathscr{H}t/\hbar}\hat{A}_S\, e^{-i\mathscr{H}t/\hbar} \qquad (\text{ب} - ۲)$$

تحول یابند به‌همان بستگی زمانی (ب ــ ۱) می‌رسیم . این دستورالعمل به‌تصویر هایزنبـرگ موسوم است .

فرض می‌کنیم که $\mathscr{H}$ صریحا" به‌زمان بستگی نداشته باشد. توجه کنیم که (ب ــ ۲) ایجاب می‌کند که $\mathscr{H}_H = \mathscr{H}_S$. بنابراین شاخص پائینی هامیلتونی لازم نیست ، هم‌چنین در $t = 0$ بردارها و عملگرهای دو تصویر بریکدیگر منطبق‌اند .

در تصویر شرودینگر یک بردار حالت می‌چرخد ، در نتیجه تصاویر آن روی ویژه ــ بردارهای عملگرهای منتسب به‌مشاهده‌پذیرها با زمان تغییرمی‌کنند و برای مقادیر قابل انتظار یک بستگی زمانی به‌شکل (ب ــ ۱) ایجاد می‌کنند . در تصویر هایزنبرگ بردار حالت ثابت می‌ماند ولی ویژه بردارهای عملگرهای هایزنبرگ می‌چرخند ، نتیجه آن ایجاد یک بستگی زمانی است که با آنچه که توسط (ب ــ ۱) داده شده است یکسان است .

در تصویر شرودینگر بردارهای حالت در معادله حرکت شرودینگر ، یعنی ،

$$\mathscr{H}\,|\beta, t\rangle_S = i\hbar \frac{d}{dt}\,|\beta, t\rangle_S \qquad \text{(ب ــ ۳ الف)}$$

صدق می‌کنند ، در حالی که در تصویر هایزنبرگ ، عملگرها در معادله حرکت هایزنبرگ، یعنی ،

$$\frac{d\hat{A}_H}{dt} = \frac{[\hat{A}_H, \mathscr{H}]}{i\hbar} + \frac{\partial \hat{A}_H}{\partial t} \qquad \text{(ب ــ ۳ ب)}$$

صدق می‌کنند . معادله (ب ــ ۳ ب) ازمشتق‌گیری از (ب ــ ۲) به‌دست می‌آید ، جمله آخر طرف راست (ب ــ ۳ ب) شامل هرنوع بستگی صریح زمانی است و به‌وسیله

$$\frac{\partial \hat{A}_H}{\partial t} = e^{i\mathscr{H}t/\hbar}\,\frac{\partial \hat{A}_S}{\partial t}\,e^{-i\mathscr{H}t/\hbar}$$

تعریف می‌شود . دو تصویر فوق به‌صورت زیر خلاصه می‌شوند

تصویر هایزنبرگ	تصویر شرودینگر
$\lvert\beta, t\rangle_H = \lvert\beta, 0\rangle$	$\lvert\beta, t\rangle_S = e^{-i\mathscr{H}t/\hbar}\lvert\beta, 0\rangle$
$\hat{A}_H = e^{i\mathscr{H}t/\hbar}\hat{A}_S\,e^{-i\mathscr{H}t/\hbar}$	$\hat{A}_S = \hat{A}(t)$
$\dfrac{d\hat{A}_H}{dt} = \dfrac{[\hat{A}_H, \mathscr{H}]}{i\hbar} + \dfrac{\partial \hat{A}_H}{\partial t}$	$\mathscr{H}\lvert\beta, t\rangle_S = i\hbar\dfrac{d}{dt}\lvert\beta, t\rangle_S$

تصاویر واسطی بین تصاویر شرودینگر و هایزنبرگ نیز می‌توانند ایجاد شوند . یک

هامیلتونی به‌شکل $\mathscr{H} = \mathscr{H}_0 + \mathcal{V}$ در نظر بگیریم. در عمل، $\mathscr{H}_0$ معمولاً نمایانگر هامیلتونی برای سیستمهای چندجسمی ایده‌آل است در صورتی که $\mathcal{V}$ مربوط به برهم‌کنش بین ذرات است. در نتیجه تصویری که باید گسترش داده شود به‌تصویر برهم‌کنشی موسوم است. تصویری در نظر بگیرید که در آن عملگرهای منتسب به‌مشاهده‌پذیرها به‌طریقی شبیه به‌عملگرهای هایزنبرگ تحول می‌یابند، یعنی،

$$\hat{A}_I = e^{i\mathscr{H}_0 t/\hbar}\hat{A}_S e^{-i\mathscr{H}_0 t/\hbar} \qquad \text{(ب ــ ۴ الف)}$$

این تصویر تصویر هایزنبرگ نیست زیرا در این رابطه $\mathscr{H}_0$ وارد شده است و نه $\mathscr{H}$. اکنون می‌پرسیم، تحول بردار حالت چگونه باید باشد تا این نتایج با (ب ــ ۱) سازگار باشند؟ تحقیق اینکه رفتار آن باید به‌صورت

$$|\beta, t\rangle_I = e^{i\mathscr{H}_0 t/\hbar}e^{-i\mathscr{H}t/\hbar}|\beta, 0\rangle \qquad \text{(ب ــ ۴ ب)}$$

باشد ساده است، در این مورد داریم

$$\langle A\rangle = \langle\beta,t|_I\hat{A}_I|\beta,t\rangle_I$$

که با (ب ــ ۱) سازگار است. توجه کنیم که (ب ــ ۴ ب) می‌تواند به‌صورت زیر نوشته شود

$$|\beta, t\rangle_I = e^{i\mathscr{H}_0 t/\hbar}|\beta, t\rangle_S \qquad \text{(ب ــ ۴ ج)}$$

معادله حرکت برای عملگرها درتصویر برهم‌کنشی‌از شکل هایزنبرگ پیروی می‌کند، یعنی

$$\frac{d\hat{A}_I}{dt} = \frac{[\hat{A}_I, \mathscr{H}_0]}{i\hbar} + \frac{\partial\hat{A}_I}{\partial t} \qquad \text{(ب ــ ۵)}$$

این رابطه می‌تواند با مشتق‌گیری از (ب ــ ۴ الف) به‌دست آید.

معادله حرکت برای بردارهای حالت در این تصویر با مشتق‌گیری از (ب ــ ۴ ج) و با استفاده از (ب ــ ۳ الف) به‌دست می‌آید. از این نتیجه می‌شود

$$\mathcal{V}_I|\beta, t\rangle_I = i\hbar\frac{d}{dt}|\beta, t\rangle_I \qquad \text{(ب ــ ۶ الف)}$$

که در آن

$$\mathcal{V}_I = e^{i\mathscr{H}_0 t/\hbar}\mathcal{V}_S e^{-i\mathscr{H}_0 t/\hbar} \qquad \text{(ب ــ ۶ ب)}$$

در تصویر برهم‌کنشی ، عملگرها برطبق $\mathscr{H}_0$ تحول‌می‌یابند درصورتی‌که بردارها بر طبق $\mathcal{V}_I$ تحول می‌یابند . با این وجود ، جواب (ب ــ ۶ الف) نمی‌تواند به‌راحتی پیدا شود زیرا $\mathcal{V}_I$ در (ب ــ ۶ ب) ، حتی وقتی که $\mathcal{V}_S$ مستقل از زمان باشد ، به‌زمان بستگی دارد . وقتی برهم‌کنشها صفر می‌شوند ،تصویر برهم‌کنشی به‌تصویر هایزنبرگ تقلیل می‌یابد . تصویر بر هم‌کنشی ، حتی وقتی که $\mathcal{V}_S$ به‌طور صریح تابع زمان باشد ، نیز معتبر است .

گرچه (ب ــ ۶ الف) نمی‌تواند به‌راحتی حل شود ، ولی با ضرب‌کردن هردوطرف آن در $dt/i\hbar$ ، انتگرال‌گیری‌و اضافه‌کردن یک مقدار ثابت اولیه ، می‌تواند به‌یک معادله انتگرالی تبدیل شود . با انجام این عملیات ، خواهیم داشت

$$|\beta, t\rangle_I = |\beta, 0\rangle + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \mathcal{V}_I(t')|\beta, t'\rangle_I\, dt' \qquad (\text{ب} - ۷)$$

در این مرحله ، بهتر است که (ب ــ۷) را ، با استفاده‌از (ب ــ ۴ ج) و (ب ــ ۴الف) ، در تصویر شرودینگر بیان کنیم ؛ بدین ترتیب خواهیم داشت

$$e^{i\mathscr{H}_0 t/\hbar}|\beta, t\rangle_S = |\beta, 0\rangle + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t e^{i\mathscr{H}_0 t'/\hbar}\mathcal{V}_S\, e^{-i\mathscr{H}_0 t'/\hbar}e^{i\mathscr{H}_0 t'/\hbar}|\beta, t'\rangle_S\, dt'$$

یا ، پس از ساده‌کردن ،

$$|\beta, t\rangle_S = e^{-i\mathscr{H}_0 t/\hbar}|\beta, 0\rangle + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t e^{-i\mathscr{H}_0(t-t')/\hbar}\mathcal{V}_S(t')|\beta, t'\rangle_S\, dt' \qquad (\text{ب} - ۸)$$

از این به‌بعد ، شاخص پائینی S در تصویر شرودینگر را حذف می‌کنیم ، نماد $\mathcal{V}(t)$ هرنوع بستگی‌صریح زمانی در پتانسیل برهم‌کنشی را شامل می‌شود . اگر $\mathcal{V}$ کوچک باشد ، یعنی ، $\mathcal{V} \to \lambda\mathcal{V}$ ، معادله (ب ــ ۸) می‌تواند با تکرارهای متوالی حل شود . تقریب مرتبه اول با قراردادن نتیجه مرتبه صفر ، $|\beta, t\rangle = e^{-i\mathscr{H}_0 t/\hbar}|\beta, 0\rangle$ ، در انتگرال به‌دست می‌آید که عبارت است از

$$|\beta, t\rangle \simeq e^{-i\mathscr{H}_0 t/\hbar}|\beta, 0\rangle + \frac{\lambda}{i\hbar}\int_0^t e^{-i\mathscr{H}_0(t-t')/\hbar}\mathcal{V}(t')e^{-i\mathscr{H}_0 t'/\hbar}|\beta, 0\rangle\, dt'$$

یا

$$|\beta, t\rangle = [\mathcal{U}^{(0)}(t, 0) + \mathcal{U}^{(1)}(t, 0)]|\beta, 0\rangle$$

که در آن

$$\mathcal{O}^{(0)}(t, 0) = e^{-i\mathcal{H}_0 t/\hbar}$$

و

$$\mathcal{O}^{(1)}(t, 0) = \frac{\lambda}{i\hbar}\int_0^t e^{-i\mathcal{H}_0(t-t')/\hbar}\mathcal{V}(t')e^{-i\mathcal{H}_0 t'/\hbar}\,dt'$$

این درست همان نتیجه برای تصحیح مرتبه اول عملگر تحول است ، که در فصل ۷ آمد به‌استثنای اینکه در اینجا t_0 مساوی با صفر گذاشته شده است . تکرارهای متوالی بالاتر از (ب ــ ۸) تصحیحات مرتبه بالاتر $\mathcal{O}^{(n)}$ را برای عملگر تحول ایجاد می‌کند .

مراجع پیشنهادی

Berestetskii, V. B., Lifshitz, E. M., and Pitaevskii, L. P., "Relativistic Quantum Theory." Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1971.

Bjorken, J. D., and Drell, S. D., "Relativistic Quantum Fields." McGraw-Hill, New York, 1965.

Goldstein, H., "Classical Mechanics." Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1950.

Heitler, W., "Quantum Theory of Radiation," 3rd ed. Oxford Univ. Press, London and New York, 1954.

Messiah, A., "Quantum Mechanics," Vol. II. Wiley, New York, 1962.

Schiff, L. I., "Quantum Mechanics," 3rd ed. McGraw-Hill, New York, 1968.

Yourgrau, W., and Mandelstam, S., "Variational Principles in Dynamics and Quantum Theory," 3rd ed. Saunders, Philadelphia, 1968.

واژه‌نامه
انگلیسی ـ فارسی

Adiabatic approximation	تقریب بی‌دررو
Adjoint	الحاقی
Angular momentum	تکانه زاویه‌ای
Canonical transformation	تبدیل بندادی
Closure relation	رابطه بستاری
Commutable	جابه‌جاپذیر
Correspondence principle	اصل تناظر
Covariant formulation	فرمولبندی هموردا
Degeneracy	تبهگنی
Dispersion relation	رابطه پاشندگی
Ehrenfest,s theorem	قضیه اهرنفست
Electric dipole approximation	تقریب دوقطبی الکتریکی
Fermi Sea	دریای فرمی
Fermi,s Golden rule	قاعده طلایی فرمی
Feynman diagrams	نمودارهای فاینمن
Gauge transformation	تبدیل پیمانه‌ای
Invariant	ناوردا

Isotropic	همسانگرد
Ladder method	روش نردبانی
Lagrangian formalism	صورتبندی لاگرانژی
Lamb shift	جابه‌جایی لمب
Lowering operator	عملگر پائین‌آورنده
Multiplicity	چندگانگی
observable	مشاهده‌پذیر
Pair Production	آفرینش جفت
Permution operator	عملگر جایگشت
Perturbation	پریشیدگی
Phonon	فونون
Poisson,s braket	کروشه پواسن
Projecting operator	عملگر تصویرگر
Quantization	کوانتش
Quantum defects	نقایص کوانتومی
Quantum Postulate	اصل موضوع کوانتومی
Quasiparticle	شبه ذره
Raising operator	عملگر بالابرنده
Secular equation	معادله سده‌ای
Selection rules	قواعد گزینش
Self-consistant field	میدان خودسازگار
Spinor	اسپینور
Stationary state	حالت مانا
Trace of operator	رد عملگر
Transition	گذار
Tunneling	تونل زنی
Ultraviolet Catastrophe	فاجعه فرابنفش
Variational method	روش وردشی
Wave - particle duality	دوگانگی موجی ـ ذره‌ای
W.K.B. approximation	تقریب W.K.B.

واژه‌نامه
فارسی ـ انگلیسی

اسپینـــور	Spinor
اصل تناظر	Correspondence principle
اصل موضوع کوانتومی	Quantum postulate
آفرینش جفت	Pair production
الحاقی	Adjoint
پریشیدگی	Perturbation
تبدیل بندادی	Canonical transformation
تبدیل پیمانه‌ای	Gauge transformation
تبهگنی	Degeneracy
تقریب بی‌دررو	Adiabatic approximation
تقریب دوقطبی الکتریکی	Electric dipole approximation
تقریب W.K.B.	W.K.B. approximation
تکانه زاویه‌ای	Angular momentum
تونل زنی	Tunneling
جابه‌جاپذیر	Commutable
جابه‌جایی لمب	Lamb shift
چند گانگـی	Multiplicity
حالت مانا	Stationary state

دریای فرمی	Fermi sea
دوگانگی موجی ـ ذره‌ای	Wave-particle duality
رابطه بستاری	Closure relation
رابطه پاشندگی	Dispersion reation
رد عملگر	Trace of operator
روش نردبانی	Ladder methad
روش وردشی	Variational method
شبه ذره	Quasiparticle
صورتبندی لاگرانژی	Lagrangian formalism
عملگر بالا برنده	Raising operator
عملگر پائین آورنده	Lowering operator
عملگر تصویرگر	Projecting oporator
عملگر جایگشت	Permutation operator
فاجعه فرابنفش	Ultraviolet catastrophe
فرمولبندی هموردا	Covariant formulation
فونون	Phonon
قاعده طلایی فرمی	Fermi,s Golden Rule
قضیه اهرنفست	Ehrenfest,s theorem
قواعد گزینش	Selection rules
کروشه پواسن	Poisson braket
کوانتش	Quantization
گذار	Transition
مشاهده‌پذیر	observable
معادله سده‌ای	Secular equation
میدان خود سازگار	Self-consistent field
ناوردا	Invariant
نقایص کوانتومی	Quantum defects
نمودارهای فاینمن	Feynman diagrams
همسانگرد	Isotropic
	Dispersion relation

فهرست راهنما

(الف)

اتمهای قلیایی
انرژی . . . ۳۸۱
برانگیختگی نوری . . . ۳۸۲
خواص . . . ۳۸۰
نقایص کوانتومی . . . ۳۸۱
اثر استارک در هیدرژن ۲۳۶
اثر پاشن ـ باک ۲۱۸
مدل کلاسیکی برای . . . ۲۲۰
ویژه تابعها و ویژه مقدارها برای . . . ۲۱۹
. . . در هلیوم ۳۶۶
اثر زیمن
. . . غیر عادی ۲۱۷–۲۴۵–۳۶۶
. . . عادی ۱۹۳
مدل کلاسیکی برای . . . ۱۹۳–۲۴۶
اثر رامسور ـ تاونزند ۱۱۵–۲۹۹
اثر فوتو الکتریکی ۱۳
اثر کامپتون ۱۶
اتم هیدرژن
چگالی احتمال زاویه‌ای برای . . . ۱۸۶
تبهگنی در . . . ۱۸۴
چگالی احتمال شعاعی برای . . . ۱۸۷
حل نسبیتی برای . . . ۴۲۱
مدارهای نیمه‌کلاسیکی برای . . . ۱۸۵
نماد گذاریهای طیف نمایی . . . ۱۸۴
قضیه ویریال برای . . . ۱۸۸
آرایش ۳۲۶–۳۳۴
ارتوهلیوم ۳۶۷
ارتو هیدرژن ۳۸۸
آزمایش داویسن ـ جرمر ۱۸
آزمایش اشترن ـ گرلاخ ۲۰۴
اسپینور ۲۱۰–۴۱۳
اشعه x و اثر کامپتون ۱۶
اصل تناظر ۲۲
اصل پاولی ۳۲۳–۳۲۹
اصل عدم قطعیت
. . . مختصه ـ تکانه ۷۷
. . . انرژی ـ زمان ۴۴۹
اثبات . . . ۷۵
نوسانگر و . . . ۱۳۷
ذره در یک چاه و . . . ۱۲۰
اصول موضوع مکانیک کوانتومی ۷۰
اصل طرد ۳۲۳–۳۲۹
اصول موضوع بوهر ۱۹
اعداد اشغال ۳۴۳
الکترونهای هم ارز ۳۳۷
آفرینش جفت ۴۱۶

الکترودینامیک کلاسیکی
تبدیل پیمانه‌ای در . . . ۴۳۶
هامیلتونی در . . . ۴۳۲–۴۳۹
لاگرانژی در . . . ۴۳۱
قانون لورنتس در . . . ۴۳۴
معادلات ماکسول در . . . ۴۳۶
پتانسیل نرده‌ای در . . . ۴۳۵
پتانسیل برداری در . . . ۴۳۵
الکترودینامیک کوانتومی
تقریب دو قطبی در . . . ۴۴۶
پهن‌شدگی طبیعی و . . . ۴۵۱
پهنای طبیعی تراز و . . . ۴۵۱
جذب و گسیل در . . . ۴۴۷
چگالی حالتها در . . . ۴۴۵
فوتونها ۴۴۹
گذارهای تابشی و قاعدهٔ طلایی در . . . ۴۴۵
الحاقی
. . . یک عملگر ۵۸
. . . یک نرده‌ای ۵۵
. . . یک بردار ۵۵
آمار
. . . بوز ــ اینشتین ۳۱۶
. . . فرمی ــ دیراک ۳۱۶
. . . ماکسول ــ بولتزمن ۱۰–۳۱۶
. . . کوانتومی ۳۴۴
انرژی
. . . تبادلی ۳۹۲
. . . حالت پایه هیدرژن ۲۱–۱۸۴
. . . ساختار ریز ۲۴۳–۴۱۱–۴۲۳
. . . سکون ۴۷
. . . پتانسیل ۲۸
. . . نقطه صفر ۱۳۴–۱۳۷
انتشاردهنده و تحول یک حالت ۹۵
انتگرال تبادلی ۳۹۲
انتگرال فاز ۴۶۲
امواج جزئی
تحلیل . . . ۲۹۳
تقریب . . . ۲۹۷
دامنه برحسب . . . ۲۹۶
قضیه نوری برای . . . ۲۹۷
مقطع مؤثر . . . ۲۹۶
آیکونال ۴۶۴
(ب)
بردار برا ۵۴
بردار کت ۵۴
بردار انتقال تکانه ۲۳۸
بردار جریان احتمال ۹۶–۱۰۹–۲۷۸
بردار حالت ۷۲
برگشت‌پذیری میکروسکوپیکی ۲۵۰–۲۵۷
برهمکنش اسپین ــ مدار ۲۱۵–۲۳۹–۴۲۱
بهنجارش احتمال ۷۲
(پ)
پاد جابه‌جاگر ۱۲۳
پایه کامل ۶۸
پتانسیل شیمیائی ۳۴۵
پتانسیل الکترومغناطیسی ۳۹
پتانسیل گریز از مرکز ۳۸۶
پتانسیل مرس ۳۸۵
پتانسیل مختلط ۹۷
پتانسیلهای وابسته به‌سرعت ۳۸
پاراهیدرژن ۳۸۸
پاراهلیوم ۳۶۷
پایه راست هنجار ۵۱
پارینه
رابطه جابه‌جایی برای . . . ۱۲۳
مسئله نیروی مرکزی و . . . ۱۸۸
مشخصه‌های انعکاسی . . . ۱۲۳
ویژه تابعهای . . . ۱۲۴
پراکندگی رادرفورد ۲۷۶–۲۸۰
پراکندگی تامسون ۱۶

پراکندگی S ــ موج ۳۰۰
پراکندگی در یک بعد
اثر رامسور برای . . . ۱۱۵
تونل زنی در . . . ۱۴۴
حد کلاسیکی برای . . . ۱۱۳
پراکندگی کشسان ۲۹۰–۲۷۳
پراکندگی ناکشسان ۳۰۶
پراکندگی کولنی ۲۸۱–۲۷۶
پراکندگی مات ۳۶۲
پراکندگی در سه بعد (کلاسیکی) ۲۷۳
. . . راترفورد ۲۷۶
مقطع مؤثر . . . ۲۷۴
پراکندگی در سه بعد (کوانتومی) ۲۷۸
تقریب بورن برای . . . ۲۸۸
تابع گرین برای . . . ۲۸۶
جذب در . . . ۳۰۶
. . . راتر فورد ۲۸۰
دامنه . . . ۲۷۹
روش مانای . . . ۲۷۷
(شرط) مجانبی در . . . ۲۷۸
ذرات تمیز ناپذیر و . . . ۳۶۱
. . . ناکشسان ۳۰۷
. . . مانا ۲۷۷
. . . و گذارها ۳۰۳
قاعده طلایی فرمی ۳۰۳
مقطع مؤثر . . . ۲۷۹
پریشیدگی مستقل از زمان ۲۲۳
اثر غیر عادی زیمن و . . . ۲۴۴
اثر استارک در هیدرژن ۲۳۶
برهم کنش اسپین ــ مدار و ساختار ریز ۲۳۹
. . . تبهگن ۲۲۳
. . . نا تبهگن ۲۲۴
روش رالی ــ شرودینگر ۲۲۴
نظریه مرتبه دوم ۲۳۰
نوسانگر ناهماهنگ و . . . ۲۳۱–۲۲۸
پریشیدگی وابسته به‌زمان ۲۴۷
الکترودینامیک کوانتومی و . . . ۴۴۳
آهنگ گذار ۲۵۰
چگالی حالتها ۲۵۴
حالتهای پیوستار و . . . ۲۵۳
عملگر تحول و . . . ۲۴۷
. . . هماهنگ ۲۵۶
قاعده طلایی فرمی ۲۵۴–۲۵۱
گذارهای القاء شده به‌وسیله . . . ۲۴۹
گذارهای تابشی در هیدرژن ۲۵۷
پوزیترون ۴۱۶–۳۲۳
پوزیترونیوم ۳۲۳
پهن‌شدگی طبیعی ۴۵۱
پهن‌شدگی خط ۴۵۱
پهنای طبیعی تراز ۴۵۱
پیمانه
تبدیل پیمانه‌ای ۴۳۶
. . . تابشی ۴۳۷
. . . عرضی ۴۳۷
. . . کولنی ۴۳۷
. . . لورنتسی ۴۳۶
پیوند کووالانت ۳۹۳–۳۸۹
(ت)
تابش جسم سیاه ۳– ۶ – ۱۰
تابع دلتا ۲۵۳–۸۶
تابع گاما ۲۸۳
تابع مولد
. . . چند جمله‌ایهای هرمیت ۱۳۴
. . . چند جمله‌ایهای لوژاندر ۱۷۲
. . . چند جمله‌ایهای لاگر ۱۸۱
تابع گرین برای پراکندگی ۲۸۶
تابش همسانگرد ۴۴۷
تابع عملگری ۷۰
تابش ۴۳۹
. . . جسم سیاه ۳

کاواک و . . . ۶
فوتونها ۴۲۲
قطبش . . . ۴۴۰
کوانتش . . . ۴۴۱
گسترش موج تخت برای . . . ۴۳۹
ماهیت عرضی . . . ۴۴۱
نوسانگرها و . . . ۴۳۹
ویژه حالتهای . . . ۴۳۹
تابع حالت ۸۷– ۹۱–۳۱۸
تابع حرارتی ۷
تار مرتعش
هامیلتونی . . . ۴۳۲
لاگرانژی . . . ۴۳۰
تابع کار ۱۳
تبهگنی ۱۱۶–۱۵۳–۳۴۱
تبهگنی تصادفی ۱۷۷–۱۷۹
تبهگنی مد ۷
تبدیلات لورنتس ۴۰۷
تراز فرمی ۳۴۴–۳۴۸–۳۷۰
تراکم بوز ــ اینشتین ۳۴۸
تراکم اینشتینی ۳۴۸
تبدیل بندادی ۴۳– ۴۵
تبدیلات لوژاندر ۴۱–۴۳۶
تبدیل به مختصات بهنجار
. . . مختصات و تکانه‌ها ۳۹۵
. . . و رابطه پاشندگی ۳۹۷
. . . و انرژیهای کوانتیده ۳۹۸
. . . و فرکانسهای بهنجار ۳۹۶
تحول یک حالت ۸۰–۸۳
ترکیب L-S ۳۳۷
تشدید ۳۰۰
تقریب بی‌دررو ۳۸۲
تقریب بورن ۲۸۸
تقریب دوقطبی الکتریکی ۲۵۸–۴۶۶
تقریب هارتری ــ فوک ــ اسلاتر
. . . میدان مرکزی ۳۷۶
خاصیت اتم در . . . ۳۷۸
معادله شرودینگر برای . . . ۳۷۳
تقریب W.K.B.
حالتهای مقید و . . . ۴۶۰
انتگرال فاز ۳۸۴
فرمولهای رابط برای . . . ۴۵۹
معادله هامیلتون ــ ژاکوبی ۴۶۲
تکانه تعمیم‌یافته ۳۵
تکانه زاویه‌ای
جمع . . . ۱۷۴
تعریف کلاسیکی . . . ۳۰
تبهگنی در . . . ۱۷۴
روش نردبانی برای . . . ۱۹۵
جابه‌جاگر برای . . . ۱۷۳
کوانتش . . . ۱۶۹
. . . اسپینی ۲۰۳
. . . کلی ۲۰۹
مدل برداری . . . ۲۱۳
ویژه تابعها و ویژه مقدارهای . . . ۱۷۰
مسئله نیروی مرکزی و . . . ۱۷۳
تکانه خطی ۲۹
تکانه نسبیتی ۴۶
تکانه شعاعی ۱۶۹
تکانه زاویه‌ای اسپینی
تجربه اشترن ــ گرلاخ ۲۰۴
فرضیه گود شمیت و اوهلنبک ۲۰۴
ماتریسهای پاولی برای . . . ۲۰۷
مسئله نیروی مرکزی و . . . ۲۰۸–۲۱۱
ویژه مقدارها و ویژه بردارهای . . . ۲۰۸
ویژگیهای تبدیلی . . . ۲۰۹
تصویر برهم‌کنشی ۸۰–۴۶۷
تصویر شرودینگر ۷۹–۴۶۶
تصویر هایزنبرگ ۸۰–۴۶۵
توابع وابسته لوژاندر ۱۷۰

تکرار یک معادله انتگرالی ۲۸۷
تمیزناپذیری ۳۲۷
توازن دقیق ۲۶۱
توزیع فرمی ــ دیراک ۳۴۷
(ث)
ثابت استفان ــ بولتزمن ۵
ثابت بولتزمن ۱۰–۳۴۵
ثابت پلانک ۱۱
ثابت ریدبرگ ۱۸–۲۲
ثابت حرکت ۳۰
ثابت ساختار ریز ۴۱۰–۴۲۳
(ج)
جابه‌جاگر ۶۰–۶۶
جابه‌جایی فاز ۲۹۵
جابه‌جایی لمب ۲۴۳–۴۲۴
جایگذاری کمینه‌ای ۴۶–۴۱۲
جریان احتمال ۹۶–۱۰۷
جمله تبادلی ۳۶۲–۳۷۶
جمله داروین ۲۴۳–۴۲۱–۴۲۵
جذب
... ذرات ۳۰۶
... القایی ۲۵۷–۴۴۸
ضریب اینشتین برای ... ۲۶۱–۴۴۸
(چ)
چاه متناهی
بستگی با چاه نامتناهی ۱۲۹
ویژه تابعها و ویژه مقادیر ... ۱۲۶
ویژگیهای تقارنی ... ۱۲۷
چاه نامتناهی
اصل عدم قطعیت برای ... ۱۲۰
ویژه توابع و ویژه مقادیر ... ۱۲۰
چاه متقارن
ویژه بردارها و ویژه مقدارهای ... ۱۲۰
مشخصه‌های ... ۱۲۲
چرخه کارنو ۵
چند جمله‌ایهای لاگر ۱۷۷–۱۸۱
چند جمله‌ایهای لوژاندر ۱۷۱
چند گانگی (تعدد) ۳۳۹
چند جمله‌ایهای هرمیت
خواص ... ۱۱
فرمول بازگشتی برای ... ۱۳۲
چگالی احتمال ۸۷
چگالی طیفی ۴–۹
چگالی طیفی پلانک ۱۲–۲۶۲–۴۴۹
چگالی مد ۹
چگالی حالتها
ذره آزاد و ... ۱۶۱
قاعده طلایی و ... ۲۵۴
(ح)
حالت خالص ۳۴۵
حالت مانا ۸۳
حالت مخلوط ۳۴۵
حالتهای پراکندگی ۱۰۷–۲۷۷
حالتهای مقید در یک بعد ۱۱۶
حد کلاسیکی ۱۹–۲۳– ۱۱۵
حرکت تقدیمی توماس ۲۱۶
حرکت تقدیمی لارمور ۱۹۴
(د)
دامنه بورن ۲۸۹
دترمینان اسلاتر ۳۲۹–۳۳۲
دترمینان یک عملگر ۵۹
درجه آزادی ۳۳
دریای فرمی ۴۱۶
دلتای کرونکر ۴۵
دمای تبهگنی بوز ــ اینشتین ۳۵۰
دوقطبی مغناطیسی
... مداری ۱۹۱
... اسپینی ۲۰۳–۲۱۵
دوگانگی موجی ــ ذره‌ای ۱۹
دینامیک کوانتومی ۷۸

دینامیک نسبیتی ۴۶

(ذ)

ذره آزاد

بهنجارش برای . . . ۱۵۵

تبهگنی برای . . . ۱۵۶–۱۷۶

جریان احتمال . . . ۱۰۹–۱۵۷

. . . در یک بعد ۱۰۸

. . . در سه بعد ۱۵۴–۱۷۵

. . . نسبیتی ۴۱۳

موج دوبروی و . . . ۱۵۷

ویژه تابعها و ویژه مقدارهای . . . ۱۵۵–۱۷۵

ذره در یک جعبه

ارتباط با ذره آزاد و بهنجارش جعبه‌ای ۱۶۰

تبهگنی برای . . . ۱۵۹

چگالی حالتها برای . . . ۱۶۱

ویژه تابعها و ویژه مقدارهای . . . ۱۵۸

(ر)

رابطه بستاری (کامل بودن) ۷۰–۸۷

رابطه پاشندگی ۳۹۷

رنسکین ۱۱۷

روابط جابه‌جایی

. . . تکانه‌های زاویه‌ای ۱۷۳–۱۹۴–۲۰۵

. . . مختصات و تکانه‌ها ۶۱–۲۷۱

. . . میدانها ۴۳۳–۴۴۱

روش رالی ــ ریتس ۲۱۶

روش میدان خود ــ سازگار

انرژی همبستگی در . . . ۳۷۳

پتانسیل مؤثر برای . . . ۳۷۴

رد

. . . یک عملگر ۵۹

. . . یک جابه‌جاگر ۸۴

روش نردبانی

تکانه زاویه‌ای و . . . ۱۵۹

نوسانگر هماهنگ و . . . ۱۴۰

(س)

سد مستطیلی ۱۱۱

سری پاشن ۲۲

سری بالمر ۲۲

سری بورن ۲۸۷

سری لیمن ۲۲

ساختار ریز

معادله دیراک و . . . ۲۴۳

معادله کلاین ــ گوردون و . . . ۴۱۰

فرمول دیراک برای . . . ۲۴۳

(ش)

شبه ذرات ۳۵۵

شبکه خطی ۳۹۳

شرایط مرزی برای E و B ۷–۴۴۰

شرایط مرزی دوره‌ای ۳۹۷

شرط مجانبی برای پراکندگی ۲۷۸–۲۸۵–۲۹۴

شعاع بوهر ۲۱–۱۸۳

(ض)

ضرایب کلبش ــ گوردان ۲۱۳–۳۳۸–۳۴۲

ضرب داخلی ۵۲–۵۴

ضرب دیادیک ۶۸

ضرب مستقیم دیراک ۲۰۷–۳۱۸–۳۴۳

ضرب داخلی بردارهای حالت ۸۹

ضریب بازتاب ۱۱۱

ضریب عبور ۱۱۱

ضریب لانده " g " ۲۴۶

(ط)

طیف

. . . یک عملگر ۶۰

. . . یک هامیلتونی ۱۰۶

طیف پیوسته ۸۶–۱۰۶

طول عمر ۴۵۰

طول موج کامپتون ۱۷

(ع)

عبور از سد ۱۱۰

عدم قطعیت ۷۴

عملگر پاد متقارن ساز ۳۲۸
عملگر بالابرنده
... تکانه زاویه‌ای ۱۹۷
... نوسانگر ۱۴۳
عملگر پائین آورنده
... تکانه زاویه‌ای ۱۹۷
... نوسانگر ۱۴۳
عملگر تبهگن ۶۳
عملگر تحول
تعریف ... ۸۰
بسط به‌سری ... ۲۴۸–۴۶۹
معادله انتگرالی برای ... ۸۱–۲۴۷
عملگر جایگشت ۳۲۰
ویژه حالتهای ... ۳۲۱
ویژگیهای تقارنی ... ۳۲۰
ویژگیهای جابه‌جاپذیری ... ۳۲۱
عملگر چگالی ۳۴۵
عملگر خطی ۵۶
عملگر تصویرگر ۶۷
عملگر متقارن ساز ۳۲۸
عملگر ناتبهگن ۶۳
عملگر همانی ۵۷
عملگر هرمیتی ۵۸
عملگر یکانی و چرخش ۵۸
(ف)
فاجعه فرابنفش ۱۱
فوتونها ۱۴–۴۴۹
فونونها ۳۹۸
فضای اعداد صحیح برای مدهای تابشی ۸
فضای هیلبرت ۸۵
فرمولهای رابط ۴۵۸
فرمول رودریگز ۱۳۵
فرمول ربد برگ ۱۸
فرمول کلاین نیشینا ۱۷
فرمولبندی هموردا ۴۰۷
فرمول کامپتون ۱۷
فرمیونها
تمیزناپذیری ... ۳۲۲
اصل پاولی برای ... ۳۲۳–۳۲۹
اسپین ... ۳۲۳
دترمینان اسلاتر برای ... ۳۲۹
تقارن حالتهای ... ۳۲۳
(ق)
قاعده بازه لانده ۲۴۲
قانون بولتزمن ۱۰– ۱۱–۲۶۰
قانون جابه‌جایی ۵–۱۲
قاعده طلایی فرمی ۲۵۱–۲۵۴–۳۰۳–۴۴۴
قطری کردن ۶۵
قواعد هاند ۳۵۲–۳۶۵
قانون دوم نیوتن
... برای یک ذره ۲۹
... برای چند ذره ۳۱۴
... نسبیتی ۴۶
قانون استفان ــ بولتزمن ۵–۱۲
قانون وین ۵–۱۲
قاعده جمع نوسانگر ۴۰۲
قطبش پذیری ۲۷۰
قطبش نور ۸–۴۴۰
قضیه اهرنفست برای نوسانگر ۷۸
قضیه نوری ۲۹۷
قضیه ویریال
... کلاسیکی ۴۸
نوسانگر و ... ۱۳۷
... کوانتومی ۱۴۹
قواعد گزینش ۲۵۸–۳۶۶
قواعد کوانتش ویلسون ــ سومرفلد ۴۶۲
(ک)
کشیدگی مرکز گریزی ۳۸۷
کروشه پواسن
تکانه‌زاویه‌ای و ... ۴۵

... مختصات و تکانه‌ها ۴۵
(گ)
گاز ایده‌آل
... بوز ـ اینشتین ۳۴۴
... فرمی ـ دیراک ۳۴۴
اعداد اشغال در ... ۳۴۴
نمایش برای ... ۳۴۴
گاز بی‌اثر ۳۸۰
گذارها
دامنه ... ۳۰۴
... تابشی ۲۵۷–۴۴۳
... پراکندگی ۳۰۳
گذارهای تابشی
الکترودینامیک کوانتومی و ... ۴۴۳
تقریب دوقطبی الکتریکی برای ... ۲۵۹
قواعد گزینش برای ... ۲۵۹
... ممنوع ۲۵۷–۲۵۹
گسیل تابش
ضرایب اینشتین در ... ۲۶۱–۴۴۸
... القایی ۲۵۶–۴۴۸
... خود به‌خودی ۲۵۸–۴۴۸
گشتاور دوقطبی الکتریکی ۲۵۸
(ل)
لاگرانژی
الکترودینامیک کوانتومی و ... ۴۳۵
... الکترو مغناطیسی ۴۰
میدانها و ... ۴۳۱
... یک ذره‌ای ۳۴
... چند ذره‌ای ۳۱۳
... نسبیتی ۴۶
(م)
ماگنتون بوهر ۱۹۳
مجموعه بندادی بزرگ ۳۴۵
متوسط مجموعه‌ای ۳۴۵
مختصات چرخه‌ای (قابل اغماض) ۳۷
مختصات استوانه‌ای
عنصر حجم در ... ۱۶۴
لاپلاسی در ... ۱۶۴
مختصات کروی
عنصر حجم در ... ۱۶۴
لاپلاسی در ... ۱۶۴
مختصات سهموی
عنصر حجم در ... ۲۸۱
لاپلاسی در ... ۲۸۰
مختصات مرکز جرمی ۳۵۶
پراکندگی در ... ۳۵۹
تبدیل به ... ۳۵۶
جرم کاهش یافته برای ... ۳۵۷
مختصات منحنی‌الخط
ضرایب متریک در ... ۱۶۳
عنصر حجم در ... ۱۶۳
لاپلاسی در ... ۱۶۳
مدل برداری ۳۳۷
مدل توماس ـ فرمی
اتمهای پیچیده و ... ۳۶۹
تابع ... ۳۷۱
شرایط مرزی برای ... ۳۷۱
متغیر ... ۳۷۱
معادله ... ۳۷۱
مدهای مشخصه ۶–۴۴۱
مسئله کولنی
پراکندگی در ... ۲۷۶–۲۷۹
چند جمله‌ایهای لاگر در ... ۱۷۷–۱۸۱
کوانتش ... ۱۷۹
معادله لاگر در ... ۱۸۱
ویژه مقدارها و ویژه بردارها در ... ۱۸۳
مسئله دو جسمی ۳۵۶
مسئله کپلر ۳۲–۳۷
مشاهده‌پذیرهای عملگری سازگار ۷۵
مشاهده‌پذیر معین (خوش تعریف) ۷۴

معادله ابر هندسی
پراکندگی راتر فورد و . . ۲۸۴
حل مجانبی . . . ۲۸۲
مسئله کولنی و . . . ۱۸۰
معادله لاگر و . . . ۱۸۱
نوسانگر همسانگرد و . . . ۱۷۷
معادله دیراک
انرژیهای منفی برای . . . ۴۱۵
ذرات آزاد و . . . ۴۱۳
ساختار ریز و . . . ۴۲۳
ماتریسهای . . . ۴۱۲
مغناطیس اسپینی و . . . ۴۱۹
هیدرژن و . . . ۴۲۱
ویژه مقدار انرژی در . . . ۴۱۴
. . . وابسته به‌زمان ۴۱۲
معادله انتگرالی بورن ۲۸۷
معادله آیکونال ۴۶۴
معادلات موج الکترومغناطیسی ۷
معادلات هامیلتون
سیستم یک ذره‌ای و . . . ۴۲
سیستم چند ذره‌ای و . . . ۴۳۵
میدانها و . . . ۴۳۲
معادله دیفرانسیل هرمیت ۱۳۱
معادله کلاین ـ گوردون
معادله شرودینگر و . . . ۴۰۹
ویژه توابع و ویژه مقادیر . . . ۴۱۰
ویژه مقدار انرژی . . . ۴۱۰
معادلات لاگرانژ
سیستم یک ذره‌ای و . . . ۳۴
سیستم چند ذره‌ای و . . . ۳۱۴
میدانها و . . . ۴۳۱
معادله لاگر ۱۸۱–۱۷۷
معادله وابسته لوژاندر ۱۷۰
معادلات ماکسول ۴۳۴
معادله فوتوالکتریکی ۱۵
معادله شرودینگر برای حرکت ۷۹
معادله موج شرودینگر ۹۳
معادله پیوستگی در احتمال ۹۶
معادله سده‌ای ۶۱
مقدار قابل انتظار ۷۳
معیار بورن ۲۸۹
مقاطع مخروطی برای مسئله کپلر ۳۸
مقطع مؤثر ۲۷۴
مقطع مؤثر بورن ۲۸۸
مولد
. . . دورانها ۲۰۹
. . . انتقالها ۹۰
مکانیک موجی
عناصر ماتریسی در . . . ۹۳
عملگر تکانه در . . . ۳۱۷–۹۲
مکانیک نیوتنی ۲۵
مولکول هیدرژن
پتانسیل مولکولی برای . . . ۳۹۱
معادله شرودینگر برای . . . ۳۹۰
نظریه لندن ـ هایتلر در مورد . . . ۳۸۹
ویژه تابعها و ویژه مقدارهای . . . ۳۹۰
مولکولهای دو اتمی
تقارن و هم هسته‌ای . . . ۳۸۸
تقریب بی‌دررو برای . . . ۳۸۴
پتانسیل مولکولی . . . ۳۸۶
معادله الکترونی برای . . . ۳۸۴
معادله شرودینگر برای . . . ۳۸۳
معادله هسته‌ای برای . . . ۳۸۶
ویژه تابعها و ویژه مقدارهای . . . ۳۸۷
مولکولهای هم هسته ۳۸۸
میدانهای کلاسیکی
الکترودینامیک و . . . ۴۳۴
لاگرانژی برای . . . ۴۳۲
معادلات لاگرانژ برای . . . ۴۳۱
معادلات هامیلتون برای . . . ۴۳۲

هامیلتونی برای ۴۳۲
میدانهای کوانتومی
قواعد جابه‌جایی برای . . . ۴۳۳
مسئله ویژه مقداری برای . . . ۴۳۴
(ن)
ناسازگاری مکان و تکانه ۷۷
نابودی زوج ۴۱۷
نامساوی شوارتز ۷۵
نقایص کوانتومی ۳۸۱
نقاط بازگشت ۴۵۷
نسبت ژیرو- مغناطیسی ۱۹۱
نظریه بوهر برای هیدرژن ۱۹
نظریه پریشیدگی تبهگن ۲۳۲
نظریه دیراک در مورد الکترونها و حفره‌ها ۴۱۶
نظریه کوانتومی اینشتین از نور ۱۴
نظریه پلانک ۱۱
نظریه رالی جینز ۱۰
نظریه کلاسیکی میدانها ۴۳۰
نظریه هامیلتون ژاکوبی ۴۴
نمایش تکانه‌ای ۸۸
نمایش N ۳۴۴
نمایش ماتریسی
عملگرها و . . . ۵۷
بردارها و . . . ۵۳
نمایش مختصه‌ای ۸۷–۳۱۸
نمودارهای فاینمن ۳۰۶
نوسانگر هماهنگ
انتشاردهنده برای . . . ۱۳۸
اصل عدم قطعیت برای . . . ۳۱۷
انرژی نقطه صفر . . . ۱۳۴–۱۳۷
تناظر کلاسیکی در . . . ۱۳۸
حالتهای غیرمانای . . . ۱۳۸
روش نردبانی در . . . ۱۴۰
خواص ویژه حالتهای . . . ۱۳۵
عملگر بالابرنده و پائین آورنده در . . . ۱۴۳
عناصر ماتریسی برای . . . ۱۳۵–۱۳۶
ویژه تابعها و ویژه مقدارهای . . . ۱۳۰
نوسانگر همسانگرد
تبهگنی تصادفی و . . . ۱۷۷
کوانتش . . . ۱۳۳–۱۷۸
معادله ابر هندسی برای . . . ۱۷۷
ویژه تابعها و ویژه مقدارهای . . . ۱۶۲–۱۷۸
نوسانگر ناهمسانگرد
تقارن و تبهگنی در . . . ۱۶۲
ویژه تابعها و ویژه مقدارهای . . . ۱۶۲
نیروهای پایستار ۳۰
نیروی تعمیم یافته ۳۵
نیروی لختی ۳۲
نیروهای وابسته به سرعت ۲۸
نیروهای مرکزی
اثرعادی‌زیمن وحرکت‌تقدیمی‌لارمور در . . . ۱۹۳
اثر غیرعادی زیمن در . . . ۲۱۸–۲۴۴
اثر پاشن ـ باک برای . . . ۲۱۸
پاریته و . . . ۱۸۸
تکانه زاویه‌ای اسپینی و . . . ۲۰۸–۲۱۰
جابه‌جاییهای انرژی در یک میدان مغناطیسی غیر یکنواخت ۱۹۰–۲۴۴
جدایی متغیرها برای . . . ۱۶۵
معادله شرودینگر برای . . . ۱۶۵
ویژه‌تابعها و ویژه‌مقدارها برای . . . ۱۶۸–۱۷۵–۲۴۴
(و)
وارون یک عملگر ۵۸
ویژه پایه یک عملگر ۶۵
ویژه اسپینور ۲۰۸
ویژه مقدارها ۶۰
عملگرهای هرمیتی و . . . ۶۲
مشاهده پذیرها و . . . ۷۱
ویژه تابعها ۸۹
ویژه بردارها

جابه‌جاگر و . . . ۶۶
عملگرهای هرمیتی و . . . ۶۲
(هـ)
هالوژنها ۳۱۶
هامیلتونی
الکترو دینامیک کلاسیکی و . . . ۴۳۶–۴۳۹
میدانها و . . . ۴۳۳
. . . یک ذره‌ای ۴۱
. . . چند ذره‌ای ۳۱۶
. . . نسبیتی ۴۶
هامیلتونی الکترومغناطیسی
. . . غیرنسبیتی ۴۲
. . . نسبیتی ۴۶
هلیوم ایده‌آل
آرایش در . . . ۳۳۵
ترکیب L - S برای . . . ۳۳۷
تبهگنی در . . . ۳۴۱
چندگانگی در . . . ۳۳۹
ضرایب کلبش ـ گوردان در . . . ۳۳۸
طبقه‌بندی حالتها در . . . ۳۳۹
ویژه تابعها و ویژه مقدارهای . . . ۳۳۲
هلیوم واقعی
انرژی و ویژه تابعهای . . . ۳۶۳
چندگانگی در . . . ۳۶۵
روش وردشی برای . . . ۳۶۷
قاعده هاند برای . . . ۳۶۵
طبقه‌بندی حالتهای . . . ۳۶۴
گذارهای تابشی در . . . ۳۶۶
نظریه پریشیدگی برای . . . ۳۶۳
هماهنگ کروی ۱۷۲
همبستگی
. . . دینامیکی ۳۱۵–۳۷۳
. . . آماری ۳۱۵–۳۲۹
هنجار یک بردار ۵۵

Ferdowsi University of Mashhad

Publication No: 107

THE FOUNDATIONS OF QUANTUM THEORY

SOL WIEDER

Fairleigh Dickinson University

Tramslated

by

JAAFAR GOODARZI

Ferdowsi University Press

1989